С. А. ВОЙТКЕВИЧ

865 ДУШИСТЫХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ПАРФЮМЕРИИ И БЫТОВОЙ ХИМИИ

МОСКВА
Пищевая промышленность
1994

УДК 668.53

Войткевич Станислав Амвросьевич

865 ДУШИСТЫХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ПАРФЮМЕРИИ И БЫТОВОЙ ХИМИИ, 1994. — 594 стр.

Представлены данные о запахе, свойствах и способах получения душистых веществ, вырабатываемых предприятиями Российской Федерации и ведущих фирм всего мира и являющихся объектами торговли. Приводятся их химические и торговые названия, структурные и брутто-формулы.

В большинстве случаев даются регистрационные номера по Chemical Abstracts и токсикологические характеристики товарных продуктов. Указывается область применения и рекомендуемая дозировка.

Книга предназначена для специалистов парфюмерно-косметической промышленности и широкого круга химиков.

2-5414

ПРЕДИСЛОВИЕ

В этой книге читатель найдет краткие сведения о многочисленных элементах мозаики запахов, из которых слагаются запоминающиеся запахи леса и морского бриза, цветов и ладана, модных дамских духов и мужского одеколона, амбры, мускуса и многих других вещей, ощущаемых посредством обоняния.

Сейчас эти элементы (душистые вещества) вырабатываются на промышленных предприятиях и являются объектами мировой торговли.

Автор надеется, что собранный материал будет интересен и поможет в работе не только специалистам парфюмерно-косметической отрасли производства, но и широкому кругу химиков.

Основные расходы по печатанию этой книги взяли на себя директор фабрики “Новая Заря” Ю. Ф. Назаров и директор Московского экспериментального завода душистых веществ А. М. Трусова, посвятившие многие годы развитию производства душистых веществ и эфирных масел в России.

Существенную помощь в финансировании издания оказали президент “Дром интернейшл” господин доктор Б. Шторп, вице-президент “Фирмених” господин Ф. Б. Буссе, директор “Хемодор С. А.” госпожа М. Хюппин, которым автор выражает сердечную благодарность.

Весьма признателен автор за содействие в организации выпуска книги сотрудникам “Инекс А. Г.” господину Х. Милошевичу и госпоже А. Ф. Демьяновой, а также главе московского отделения “Фирмених” господину М. Богушу.

Большое спасибо коллегам по работе А. Г. Бельфер, Н. А. Косульниковой и И. С. Аульченко за помощь в подборе специальной литературы и за просмотр рукописи.

ВВЕДЕНИЕ

Ускоренное развитие, начиная с 50-х годов текущего столетия, тонкой органической химии и методов инструментального анализа, особенно в приложении к исследованию состава эфирных масел, внесло существенный вклад в практику производства душистых веществ, пригодных для использования в парфюмерии и при создании отдушек для мыла, косметических изделий и товаров бытовой химии.

По оценке доктора Г. Олоффа, видного специалиста в области душистых веществ и эфирных масел, в 1990 г. в распоряжении парфюмеров имелось около 3500 душистых веществ с установленной химической структурой.

Рассмотрение каталогов основных фирм — изготовителей душистых веществ показывает, однако, что практически производится не более 1/3 указанного их количества. Вероятно, многие продукты не выпускаются по причинам экономического или экологического характера, а некоторые хотя и изготавливаются, но используются только в композициях и отдушках данной фирмы, чтобы на какое-то время сохранить "секрет" их производства и применеиня.

В настоящем справочном издании собран материал о 865 душистых веществах, вырабатываемых на промышленных или полузаводских установках и являющихся объектами торговли.

Каждому продукту присвоен один номер (независимо от сорта, чистоты, оптической изомерии), даны химическое и торговые названия, приведены структурная и брутто-формулы, величина молекулярной массы и регистрационный номер по Chemical Abstracts (C. A.). В случае использования изомерных смесей указан вид изомерии и, где это возможно, приводятся данные об изомерном составе.

Даются сведения о нахождении в природе, токсикологических характеристиках [1], чистоте, физических свойствах. Если продукт вырабатывается несколькими производителями, то их данные о чистоте, плотности, показателе преломления и температуре вспышки сопоставляются между собой.

Характеристики запаха даются в основном по оценкам фирм-производителей (без рекламных преувеличений).

Приводятся данные о возможных способах промышленного получения и в некоторых случаях — химические схемы синтезов.

Исходя из химического строения душистых веществ, принято следующее их распределение по группам:

1. Алифатические соединения.
2. Ациклические терпеноиды.
3. Циклические терпеноиды.

[1] Токсикологические характеристики в основном взяты из монографов RIFM (Research Institute Fragrances Materials, USA), регулярно публикуемых в журнале "Food Chem. Toxicologie". На основании материалов этого института международная комиссия IFRA (International Fragrance Association) вводит те или иные ограничения для применения данного душистого вещества в парфюмерных композициях и отдушках.

4. Циклоалифатические соединения.
5. Макроциклические соединения.
6. Ароматические соединения.
7. Кислородсодержащие гетероциклы.

Порядок изложения в группах указан в начале рассмотрения каждой группы.

Предметный указатель составлен в латинской транскрипции, поскольку подавляющее большинство торговых названий обычно дается латинскими буквами. За основу взяты номера веществ (а не номера страниц!). Первая цифра обозначает номер группы; дальше после точки следует номер соединения в данной группе.

Для удобства пользования ссылки на специальную литературу даются выборочно и непосредственно при описании данного вещества.

Кроме научных публикаций в периодических изданиях и материалов патентов использованы:

1. Труды ВНИИСНДВ, вып. I-II, IV-IX, Москва, Пищепромиздат, 1952–1971.
2. Ю. И. Дучинская, А. Г. Чебышев. Производство синтетических душистых веществ, Москва, Пищепромиздат, 1959.
3. Л. М. Шулов, Л. А. Хейфиц. Душистые вещества и полупродукты парфюмерно-косметического производства, Москва, Агропромиздат, 1990.
4. И. Н. Братус. Химия душистых веществ, Москва, Агропромиздат, 1992.
5. E. Gildemeister, F. Hoffman, Die Ätherischen Öle, Bd. III (a-d), Berlin, Akademie Verlag, 1960-1966.
6. S. Arctander, Perfume and Flavor Chemicals, Montclair, USA, 1969.
7. P. Z. Bedoukian, Perfumery and Flavoring Synthetics, Allured Publ. Corp., Wheaton, USA, 1986.
8. K. Bauer, D. Garbe, H. Surburg, Commonn Fragrance and Flavor Materials, VCH, Weinheim, BRD, 1990.
9. RIFM, Fragrance raw material monographs, 1973-1988, Food Cosm. Toxicologie — Food Chem. Toxicologie, Pergamon Press.
10. G. Ohloff, Riechstoffe und Geruchssinn, Springer–Verlag, Berlin – Heidelberg, 1990.
11. Merck (Каталог — реактивы, диагностика, препараты), 1992–1993.
12. Каталоги фирм - производителей душистых веществ.

При упоминании фирм — производителей душистых веществ применены следующие сокращения:

BASF — BASF Aktiengesellschaft, BRD.
BBA — Bush Boake Allen, England.
Bedouk. — Bedoukian Research Inc., USA.
Dragoco — Dragoco Gerberding Co, BRD.
EOA — Essential Oil Association, USA.
Firm. — Firmenich S. A., Schweiz.
GIV — L. Givaudan, Schweiz — USA.
Henkel — Henkel KGaA, BRD.

H.+R. — Haarmann und Reimer GmbH, BRD.
Hüls —Hüls Aaktiengesellschaft, BRD.
IFF — International Flavors and Fragrances Inc., USA — Holland.
KAO — Kao Corporation, Japan.
Miltitz — Miltitz, Duft und Aroma GmbH, BRD.
Naarden — Naarden International, Holland.
PFW — PFW (Nederland) B. V., Holland.
Quest — Quest International, England — Holland.
Roure — Roure Bertrand Dupont, France.
R.-P. — Rhône-Poulenc, France.
TAK — Takasago International Corp., Japan.
Wacker — Wacker-Chemie GmbH, BRD.

Приводятся синонимы торговых и химических названий рассматриваемых веществ, в том числе название и номер соединения по справочнику С. Арктандера (Arc. ......) и название, принятое в монографах RIFM.

Под термином **острая токсичность** подразумевается средняя смертельная доза (г/кг) вещества по ГОСТ 12.1.007-76 в экспериментах с животными: oral LD_{50} — при введении в желудок, derm. LD_{50} — при нанесении на кожу.

Температура во всех случаях дается по стоградусной шкале Цельсия. Ее обозначения: т. кип. — температура кипения; т. пл. — температура плавления; т. заст. — температура застывания; т. всп. — температура вспышки.

Данные по т. всп., приводимые зарубежными фирмами, определены в закрытом тигле.

Давление дается в гектопаскалях (гПа, hPa). 1 гПа = 100 Па = 1 миллибар = 0,752 мм рт. ст.; 1 мм рт. ст. = 1,33 гПа.

Обозначение P_{20} — давление насыщенного пара при 20°C.

Данные по **поверхностному натяжению** (γ_{20}) приводятся в динах на сантиметр (дин/см); 1 дин/см = 10^{-3} ньютон/м.

Величины **динамической вязкости** σ_{20} даются в сантипуазах. 1 спуаз = 10^{-3} ньютон·сек/м^2.

Другие встречающиеся технические обозначения:

$d_{t_1}^{t_2}$ — плотность вещества;
n_D^{20} — показатель преломления света при 20°C (по желтой линии спектра);
$[\alpha]_D^t$ — угол вращения плоскости поляризации света;
ГЖХ — определено методом газо-жидкостной хроматографии;
ацетил. — определено ацетилированием;
формил. — определено формилированием;
оксим. — определено оксимированием;
омыл. — определено омылением;
КЧ — кислотное число;
ЭЧ — эфирное число;
ЭМ — эфирное масло;

Приняты следующие сокращения:

ВНИИСНДВ — Всесоюзный научно-исследовательский институт синтетических и натуральных душистых веществ;
КНР — данные предприятий Китайской Народной Республики;
РФ — данные предприятий Российской Федерации;
СДВ — синтетические душистые вещества;
РЖХ — Реферативный журнал. Химия.

1. АЛИФАТИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ

1.1–1.29. УГЛЕВОДОРОД, СПИРТЫ, ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ

1.1. Ундекатриен

1,3,5-Ундекатриен,(3E, 5 Z) -1,3,5-ундекатриен, Undecatriene-1,3,5 (Arc. 3032), 1.3.5-Undecatriene (Bedouk.), Galbanolen. $C_{11}H_{18}$; 150,26

C. A. 16356-11-9; 51447-08-6

Содержится в резиноиде и ЭМ гальбанума в количестве меньше 1%.

Изомер (3E, 5Z) имеет очень сильный характерный запах гальбанума. Сплошь *транс*-изомер имеет жирный оттенок запаха, напоминающий льняное масло, жир печени трески. Жидкость, т. кип. 80–85°C/6,7 гПа, n_D^{20} 1,511–1,512. Представленные в каталоге Bedouk. (1983) два сорта ундекатриена, по всей вероятности, вырабатываются в лаборатории или на полузаводских установках, поскольку схемы синтеза многостадийны и носят препаративный характер. Одна из подобных схем была предложена П. Тессером и др. в 1967 г. (P. Tesseire и др., Recherches 1967, № 16,5; швейц. пат. 479506, 15.03.67–28.11.69, РЖХ, 1970, 14Р510П).

1.2. Октиловый спирт

Октанол, Octanol-1 (Arc. 2401), Alcohol C-8 (RIFM, GIV, H. + R., KAO). $C_8H_{18}O$; 130,23

C. A. 111-87-5

Содержится в апельсиновом, грейпфрутовом и других ЭМ. Запах — сильный, жирно-цитрусовый. Жидкость, т. кип. 195°C/1013 гПа; P_{20} 0,15 гПа; γ_{20} 26,7 дин/см; σ_{20} 8,4 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (ацетил.)	0,822–0,828	25/25	1,426–1,432	86
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,822–0,828	25/25	1,428–1,431	86
KAO, 1985	98 (ГЖХ)	0,824–0,830	20/20	1,426–1,432	86

Получают очисткой технического октилового спирта. В последнее время технический октиловый спирт чаще всего синтезируют по Циглеру из этилена и алюминийорганических соединений. При этом получают смесь нормальных спиртов с четным количеством атомов углерода в молекуле, которую разделяют ректификацией.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.3. Нониловый спирт

Нонанол, Nonanol-1 (Arc. 2348), Alcohol C-9 (RIFM, GIV, H.+R.). $C_9H_{20}O$; 144,26

C. A. 143-08-8

Содержится в апельсиновом ЭМ и в резиноиде дубового мха. Запах — сильный, жирно-цветочный, ноты розы, апельсина. Жидкость, т. кип. 213,5-215°C/1013 гПа; P_{20} 6,4·10^{-2} гПа; γ_{20} 26,4 дин/см; σ_{20} 11,6 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5,7 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	97 (ацетил.)	0,824–0,830	1,431–1,435	99
H.+R., 1988	95 (ГЖХ)	0,825–0,829	1,432–1,435	98

Получают гидрированием сложных эфиров пеларгоновой кислоты и тщательной очисткой.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.4. Дециловый спирт

Деканол, Decanol-1 (Arc. 841), Alcohol C-10 (RIFM, GIV, H.+R.). $C_{10}H_{22}O$; 158,29

OH

C. A. 112-30-1

Содержится в апельсиновом и некоторых других ЭМ. Запах — жирный, воска с нотами розы, цветов апельсина. Жидкость, т. кип. 231°C/1013 гПа; 109,5°C/10,7 гПа; P_{20} $3{,}2\cdot10^{-2}$ гПа; γ_{20} 27,3 дин/см; σ_{20} 13,8 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 12,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,6 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	99 (ацетил.)	0,826–0,832	25/25	1,435–1,439	104
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,826–0,830	25/25	1,436–1,439	>100
KAO, 1985	96 (ГЖХ)	0,826–0,832	20/20	1,434–1,440	>100

Парфюмерный дециловый спирт может быть выделен ректификацией смеси спиртов, получаемых по Циглеру из этилена.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях.

1.5. Ундециловый спирт

Ундеканол, Undecanol-1 (Arc. 3031), Alcohol C-11, undecylic (RIFM, GIV), Alcohol C-11 (H.+R.). $C_{11}H_{24}O$; 172,31

OH

C. A. 112-45-5

Запах — слабый цитрусовый с жирно-восковой нотой. Жидкость, т. пл. 16°C, т. кип. 248°C/1013 гПа, 130°C/16 гПа; P_{20} $1{,}5\cdot10^{-2}$; γ_{20} 25,5 дин/см; σ_{20} 17,2 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	97 (ацетил.)	0,828–0,834	1,437–1,443	>100
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,829–0,833	1,437–1,442	>100

Получают каталитическим гидрированием метилового или бутилового эфиров ундециловой кислоты с последующей тщательной очисткой.

Используют в малых дозах в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.6. Додециловый спирт

Додеканол, лауриловый спирт, Dodecanol (Arc. 1108), Alcohol C-12 (RIFM, GIV, H.+R., KAO). $C_{12}H_{26}O$; 186,34

OH

C. A. 112-53-8

Содержится в ЭМ лайма и некоторых других. Запах — слабый жирный с цветочно-цитрусовыми нотами. Твердая масса, т. пл. 26°C, или переохлажденная жидкость, т. кип. 259°C/1013 гПа, 150°C/27 гПа; P_{20} $7{,}3\cdot10^{-3}$ гПа; γ_{20} 26,1 дин/см; σ_{20} 18,8 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 12,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >10 мл/кг (морские свинки).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	97 (ацетил.)	0,830–0,836	25/25	1,440–1,444	>100
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,831–0,833	25/25	—	>100
KAO, 1985	97 (ГЖХ)	0,817–0,823	20/20	—	>100

Примечание: продукт, вырабатываемый H.+R., должен иметь т. заст. ⩾23°С.

Получают каталитическим гидрированием эфиров лауриновой кислоты или выделением из смеси синтетических спиртов, вырабатываемых из этилена по методу Циглера.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.7. 3-Нонанол

Нонан-3-ол, этилгексилкарбинол, 3-Nonanol (Arc. 2349), Apricosol (H.+R.). $C_9H_{20}O$; 144,25

OH

С. А. 624-51-1

Запах напоминает запах кокосовых орехов, оттенки — цветочный, абрикоса. Жидкость, т. кип. 206°С/1013 гПа.

Продукт, вырабатываемый H.+R., содержит минимум 98% спиртов (ацетил.) и имеет d_{25}^{25} 0,820–0,828; n_D^{20} 1,428–1,434; т. всп. 84°С.

В небольших количествах используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

1.8. Метилгептенол

6-Метил-5-гептен-2-ол, Methylheptenol (Arc. 2042, GIV). $C_8H_{16}O$; 128,22

OH

С. А. 1335-09-7

Содержится в лемонграссовом и линалоевом ЭМ. (+)-Метилгептенол является феромоном жучка хвойных деревьев и имеет название "сулкатол".

Запах — зелени с цитрусовым оттенком и нотой кориандра. Жидкость, т. кип. 178–180°С/1013 гПа, 76–78°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продукт GIV (1973) содержит минимум 95% метилгептенола и имеет d_{25}^{25} 0,848–0,852; n_D^{20} 1,448–1,450.

Простейший способ получения — селективное каталитическое гидрирование 6-метил-5-гептен-2-она.

Используется в небольших дозах в ограниченном количестве парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

1.9. *трет*-Диметилгептанол

2,6-диметил-2-гептанол, Lolitol (IFF), Dimetol (GIV), Dimethylheptanol (BASF). $C_9H_{20}O$; 144,26

OH

С. А. 13254-34-7

Запах — свежий, цветочный. Жидкость, т. кип. 179–182°С/1013 гПа. Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} > 5 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97	0,812–0,820	20/4	1,424–1,429	69
GIV, 1984	97	0,812–0,819	20/4	1,424–1,428	63
BASF, 1987	98	0,812–0,815	25/25	1,425–1,427	63

Возможные способы получения — взаимодействие 2-метил-2-гептен-6-она с метилмагнийхлоридом по Гриньяру и последующее каталитическое гидрирование или действие метилмагнийбромида на 2-метилгептан-6-он (Daniewski W., польск. пат. 50163, 17.01.64–20.12.65, РЖХ, 1967, 20Р464П).

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.10. 2,4-Диметилгептанол

Dimethylheptol (Wacker). $C_9H_{20}O$; 144, 26

Запах — листвы и дерева, травянистый, оттенки — жирный, запаха розы. Жидкость, т. кип. 87°С/14 гПа.

Продажный продукт Wacker содержит минимум 96% (ГЖХ) смеси изомерных спиртов и имеет $d_{20}^{20} \sim 0,835$; n_D^{20} 1,430–1,438; т. всп. 81°С.

Простейший путь получения — каталитическое гидрирование 2,4-диметил-2,6-гептадиеналя (Dimedienal).

1.11. 2-Метилоктан-2-ол

Диметилгексилкарбинол, Methyloctanol (Wacker). $C_9H_{20}O$; 144,26

С. А. 628-44-4

Запах — мягкий, цветов и зелени с пряным и маслянистым оттенками. Жидкость, т. кип. 78°С/16 гПа, 68°С/8 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый Wacker (1987), содержит ~98% (ГЖХ) метилоктанола и имеет $d_{20}^{20} \sim 0,820$, n_D^{20} 1,427–1,431, т. всп. 69°С.

Один из способов получения — взаимодействие октан-2-она с метилмагнийхлоридом по Гриньяру.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.12. Диметилнонан-2-ол

6,8-Диметилнонан-2-ол, Nonadyl (GIV). $C_{11}H_{24}O$; 172,31

С. А. 70214-77-6

Запах — цветочно-фруктовый с оттенками запаха зелени, грибов.

Продажный продукт, вырабатываемый фирмой GIV (1987), представляет собой жидкость, содержащую не менее 98% (ГЖХ) диметилнонанола, d_4^{20} 0,823-0,828; d_{25}^{25} 0,822-0,827; n_D^{20} 1,433–1,438; т. всп. 93°С.

Возможный путь получения — последовательные: этинилирование метилизобутилкетона, селективное восстановление до 3,5-диметил-1-гексен-3-ола, получение 6,8-диметил-5-нонен-2-она, его исчерпывающее гидрирование.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.13. Пентаметилгептан-2-ол

3,4,5,6,6-Пентаметилгептан-2-ол и другие изомеры, Kohinool (IFF). $C_{12}H_{26}O$; 186,34

С. А. 81787-06-6

Запах — цветочно-амбровый с древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 105–107°С/2,7 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 5,9 г/кг, derm. $LD_{50} > 2$ г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомерных спиртов и имеет d_4^{20} 0,864-0,872; n_D^{20} 1,454–1,460; т. всп. 93°С.

Получают исчерпывающим каталитическим гидрированием смеси изомерных ацетилдиизоамиленов (Boden R. M., пат. США 4391999, 16.07.82–5.07.83, РЖХ, 1984, 4Р589П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 35%. Ограничений IFRA нет.

1.14. *цис*-3-Гексенол

Цис-3-Гексен-1-ол, (Z)-3-гексенол, спирт листьев, *cis*-3-Hexenol (Arc. 1604, RIFM, IFF), Hexenol *cis* (GIV), Leaf alcohol. $C_6H_{12}O$; 100,17

С. А. 928-96-1

Содержится во многих растениях и в ЭМ зеленого чая. Имеет интенсивный запах свежескошенной травы. Жидкость, т. кип. 156–157°C/1013 гПа, 66–67°C/25 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание *цис*-изомера (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1984	93	0,847–0,851	1,439–1,441	54	—
IFF, 1992	95	0,846–0,854	1,438–1,443	64	*цис+транс* 98%

Получают взаимодействием 1-бутина с этиленоксидом (в жидком аммиаке с амидом натрия) и последующим частичным стереонаправленным каталитическим гидрированием полученного 3-гексинола.

Используется в небольших дозах (до 1%) в парфюмерных композициях и пищевых эссенциях, а также для получения сложных эфиров. Ограничений IFRA нет.

1.15. Диметилгептенол

2,6-Диметил-5-гептен-2-ол, Dimethylheptenol (Arc. 1012, BASF). $C_9H_{18}O$; 142,24

Запах — свежий цветочный, подобный запаху лаванды с древесным оттенком. Жидкость, т кип. 180°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт BASF (1987) содержит минимум 98% (ГЖХ) диметилгептенола и имеет d_{25}^{25} 0,841–0,845; n_D^{20} 1,437–1,438; т. всп. 73°C.

Один из способов получения — взаимодействие 2-метил-2-гептен-6-она с метилмагнийхлоридом по Гриньяру.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.16. Октен-3-ол

1-Октен-3-ол, амилвинилкарбинол, Amylvinylcarbinol (Arc. 231, RIFM, IFF), Matsutakeol (TAK), Morillol (BASF). $C_8H_{16}O$; 128,22

C. A. 3391-86-4

Содержится в некоторых грибах, лавандовом и лавандиновом ЭМ. Запах — грибной, лесной зелени с оттенком запаха лаванды. Жидкость, т. кип. 175°C/1013 гПа, 79–81°C/20 гПа, 53°C/4,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 0,34 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	0,831–0,839	20/4	1,434–1,440	63
TAK, 1987	98	0,832–0,840	25/25	1,434–1,440	63
BASF, 1987	98,5	0,830–0,850	25/25	1,418–1,421	68

Может быть получен взаимодействием гексаналя с винилмагнийхлоридом по Гриньяру.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Обычная дозировка — до 1%.

1.17. 9-Деценол

9-Децен-1-ол, ω-деценол, *omega*-Decenol (Arc. 844), Decylenic alcohol (RIFM), Rosalva (IFF), Trepanol (TAK), 9-Decenol-1 (Hüls).

$C_{10}H_{20}O$; 156,27

OH

C. A. 13019-22-2

Запах — восков розы с альдегидным оттенком. Жидкость, т. кип. 94 96/4 гПа, 85-86°C/2,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
IFF, 1992	97	0,841-0,849	20/4	1,446-1,451	>100	—
TAK, 1987	97	0,840-0,850	25/25	1,445-1,450	110	—
Hüls, 1990	95	~0,847	20/4	—	119	Т. заст. -13°C

Получается частичной дегидратацией 1,10-декандиола.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Оттенки запаха розы проявляются при разбавлении. Обычная доза ввода в композиции — до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.18. 10-Ундеценол

10-Ундецен-1-ол, ундециленовый спирт, 10-Undecen-1-ol (Arc. 3039), Alcohol C-11, undecylenic (RIFM, GIV, IFF).

$C_{11}H_{22}O$; 170,30

OH

C. A. 112-43-6

Запах — свежий с нотами воска, цитрусов, розы; в концентрированном виде — жирный. Жидкость, т. кип. 133°C/21 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	97	0,843-0,847	1,449-1,454	110
IFF, 1992	97	0,842-0,850	1,448-1,452	110

Получают восстановлением сложных эфиров ундециленовой кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Дозировка не превышает 10%. Ограничений IFRA нет.

1.19. 4-Метил-3-децен-5-ол

Undecavertol (GIV).

$C_{11}H_{22}O$; 170,30

OH

C. A. 81782-77-6

Запах — сильный, цветов и зелени, оттенки запаха ландыша, фиалки.

Продажный продукт GIV (1987) — жидкость, содержащая минимум 97% (ГЖХ) 4-метил-3-децен-5-ола; имеет d_4^{20} 0,842-0,848; d_{25}^{25} 0,841-0,847; n_D^{20} 1,449-1,454; т. всп. 98°C.

Возможный путь получения — конденсация этилпентилкетона с пропионовым альдегидом и последующее селективное восстановление карбонильной группы.

Используется в парфюмерных композициях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.20. Травеол

2,2,5-Триметил-4-гексенол, 2-метил-2-ирениллропанол, Traveol (РФ).

$C_9H_{18}O$; 142,24

OH

Запах — сильный, травы и свежей зелени. Жидкость, т. кип. 53–55°С/4 гПа; P_{20} 0,19 гПа. Парфюмерный травеол имеет чистоту минимум 90% (ГЖХ), $d_4^{20} \sim 0,863$; $n_D^{20} \sim 1,454$; т. всп. 70°С.

Получают селективным каталитическим гидрированием травеаля иа медно-хромовом катализаторе (Войткевич С. А. и др., авт. свид. 523073, 25.06.70–30.07.76). Травеаль (2,2,5-триметил-4-гексеиаль) может быть получен взаимодействием диметилвинилкарбинола с изомасляным альдегидом или алкилированием изомасляного альдегида пренилхлоридом в условиях катализа фазового переноса.

Травеол может использоваться в парфюмерных композициях для модификации головных иот запаха.

1.21. Ирисол

2-Бутил-2-этил-5-метил-4-гексенол, 3-гидроксиметил-3-пренилгептан, Irisol (РФ). $C_{13}H_{26}O$; 198,35

Запах — древесный с оттенком запаха зелени. Жидкость, т. кип. 83–85°С/2,7 гПа; $d_4^{20} \sim 0,871$; n_D^{20} 1,466; $P_{20}\,3,2 \cdot 10^{-3}$ гПа.

Продажный продукт (РФ, 1990) содержит минимум 90% (ГЖХ) указанного спирта и имеет n_D^{20} 1,464–1,468.

Получают селективным каталитическим гидрированием ирисаля (С. А. Войткевич и др., авт. свид. 523073, 25.06.70–30.06.76).

Может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

1.22. Диметилвинилгептенол

3,6-Диметил-3-винил-5-гептен-2-ол, Lavinol (Wacker). $C_{11}H_{20}O$; 168,28

Запах — свежий травянистый, типа лаванды с бальзамическим и древесным оттенками. Жидкость, т. кип. 77°С/2 гПа. Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~96% (ГЖХ) названного спирта и имеет $d_4^{20} \sim 0.883$, n_D^{20} 1,470 – 1,475, т. всп. 80°С.

Возможный путь промышленного получения — алкилирование 3-метил-3-пентен-2-она пренилхлоридом в условиях катализа

фазового переноса и последующее восстановление карбонильной группы.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 1–5%.

1.23. Диметилвинилоктенол

4,7-Диметил-4-винил-6-октен-3-ол, Geraminol (Wacker). $C_{12}H_{22}O$; 182,31

Запах — зелени, пряный, напоминает запах листьев герани, розмарина. Жидкость, т. кип. 76–77°С/0,8 гПа. Продажный продукт Wacker (1987) имеет чистоту ~94% (ГЖХ, сумма изомеров); $d_4^{20} \sim 0,882$; n_D^{20} 1,468 – 1,480; т. всп. 90°С.

Возможный путь промышленного получения — алкилирование 4-метил-4-гексен-3-она пренилхлоридом в условиях катализа фазового переноса и последующее восстановление карбонильной группы.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках в дозах до 20%.

1.24. 2-Этил-2-пренил-3-гексенол

Silwanol (Wacker). $C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах — интенсивный цветочно-древесный с нотами запаха ветиверового ЭМ, стойкий. Жидкость, т. кип. 95°С/0,8 гПа. Продажный

продукт Wacker (1987) содержит ~91% (ГЖХ) смеси изомеров названного спирта и имеет d_4^{20} ~ 0,883; n_D^{20} 1,472 – 1,478; т. всп. >100°С.

Промышленное получение осуществляют алкилированием 2-этил-2-гексеналя пренилхлоридом в условиях катализа фазового переноса и последующим восстановлением по Меервейну—Пондорфу (Gebauer H. и др., Заявка ФРГ 3341604, 17.11.83-30.05.85, РЖХ, 1986, 4Н31П).

Продукт используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 5–15%.

1.25. Нонадиенол

2-(E)-6(Z)-Нонадиенол, *транс*-2-*цис*-6-нонадиенол, Nonadienol (Arc. 2341), 2,6-Nonadienol (RIFM), Violett leaf alcohol, Cucumber alcohol. $C_9H_{16}O$; 140,23

C.A. 7786-44-9; 63450-36-2

Содержится в огурцах, листьях и цветах фиалки.

Запах — чрезвычайно сильный, проникающий, травы, зелени, листьев. Жидкость, т. кип. 196°С/1013 гПа, 96–100°С/15 гПа, d_{25}^{25} 0,862, n_D^{25} 1,463.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (мыши), derm. LD_{50} > 5 г/кг (морские свинки).

Парфюмерный продукт обычно готовится в лабораторных условиях или на полузаводских установках. Один из путей получения — превращение *цис*-3-гексенола в соответствующий магнийбромид, его взаимодействие с акролеином и аллильная перегруппировка полученного винилкарбинола в нонадиенол.

Используется в парфюмерных композициях в очень малых дозах, часто в виде растворов. Ограничений IFRA нет.

1.26. Гексилметиловый эфир

1-Метоксигексан, метилгексиловый эфир, Methyl-*n*-hexylether (Arc. 2065), Diola (IFF). $C_7H_{16}O$; 116,21

C.A. 4747-07-3

Запах — эфирный, фруктовый (груши). Жидкость, т. кип. 126°С; γ_{20} 23,2 дин/см. IFF (1992) вырабатывает продукт, содержащий минимум 97% (ГЖХ) гексилметилового эфира с d_4^{20} 0,767 – 0,775; n_D^{20} 1,395–1,401; т. всп. 24°С.

Используется главным образом в отдушках для промышленных изделий.

1.27. Децилметиловый эфир

Метилдециловый эфир, 1-метоксидекан, Decyl methyl ether (IFF). $C_{11}H_{24}O$; 172,31

C.A. 7289-52-3

Запах — свежий, типа запаха лауринового альдегида с оттенком лаванды. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит минимум 97% (ГЖХ) децилметилового эфира и имеет d_4^{20}0,793 – 0,801, n_D^{20}1,419 – 1,424, т. всп. 84°С.

Один из методов получения — взаимодействие децилового спирта с метанолом в присутствии серной кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

1.28. Децилвиниловый эфир

Винилдециловый эфир, Decyl vinyl ether (Arc. 868), Decave (IFF). $C_{12}H_{24}O$; 184,31

C.A. 765-05-9

Запах — свежий, нота розы с жирным оттенком и нюансом зелени. Жидкость.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 3,9 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) децилвинилового эфира и имеет d_4^{20}0,879 – 0,887; n_D^{20}1,432 – 1,436; т. всп.>100°С.

Может быть получен взаимодействием децилового спирта с ацетиленом под давлением в присутствии алкоголята.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.29. Дипропиленгликоль

2,2'-Дигидроксидипропиловый эфир, Dipropylene glycol (RIFM, Hüls), DPG. $C_6H_{14}O_3$; 134,18

C.A.110-98-5

Вязкая жидкость без запаха. Смесь трех изомеров, т. кип. 228–236°С/1013 гПа, σ_{20} ~106 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 14,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией Hüls (1969) продажный продукт должен содержать не менее 99% (ацетил.) смеси изомерных гликолей и иметь d_4^{20} 1,022 – 1,024; n_D^{20} ~ 1,441, т. всп. ~120°С. Каталог Merck (1992/1993) предусматривает выработку дипропиленгликоля минимум 97%-ного (ГЖХ, смесь изомеров) содержания с d_4^{20} 1,020–1,022 и т. всп. 138°С. Получают из отходов производства 1,2-пропиленгликоля фракционированной дистилляцией.

Используют сотнями тонн в качестве растворителя — компонента парфюмерных композиций и отдушек различного назначения. Ограничений IFRA нет.

1.30–1.65. АЛЬДЕГИДЫ И АЦЕТАЛИ

1.30. Октиловый альдегид

Октаналь, н-октаналь, каприловый альдегид, n-Octanal (Arc. 2397, Firm.), Aldehyde C-8 (RIFM, GIV, H.+R., BASF, KAO, IFF).

$C_8H_{16}O$; 128,22

CHO

C.A. 124–13–0

Содержится в цитрусовых и других ЭМ.

Запах — сильный резкий, при разбавлении — запах недозрелых цитрусов. Жидкость, т. кип. 171–173°С/1013 гПа, 82°С/17 гПа; P_{20} 1,0 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 5,63 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} 6,35 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1987	92	0,811–0,831	20/4	1,417–1,425	59
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,818–0,822	25/25	1,417–1,420	54
IFF, 1992	95	0,818–0,826	20/4	1,416–1,421	54
BASF, 1987	98	0,810–0,830	25/25	1,417–1,425	52
KAO, 1985	98	0,818–0,826	20/20	1,415–1,420	57
Firm., 1992	—	0,820–0,826	20/20	1,415–1,425	54

Обычно получают дегидрированием октанола на специальных катализаторах.

Используют в дозах до 3% в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет. В больших количествах используется для синтеза гексилкоричного альдегида.

1.31. Нониловый альдегид

Нонаналь, н-нонаналь, пеларгоновый альдегид, n-Nonanal (Arc. 2343, Firm.), Aldehyde C-9 (RIFM, GIV, IFF, H.+R., KAO).

$C_9H_{18}O$; 142,24

CHO

C. A. 124-19-6

Содержится в цитрусовых, розовом, мускатно-шалфейном и других ЭМ.

Запах — сильный, жирный, при разбавлении проявляются цитрусово-цветочные ноты. Жидкость, т. кип. 190–192 °С / 1013 гПа, 91–92 °С/ 29 гПа; P_{20} 0,36 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы-альбиносы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики-альбиносы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	95 (ГЖХ)	0,823–0,826	20/4	1,422–1,426	82
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,820–0,828	20/4	1,421–1,426	71
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,821–0,825	25/25	1,422–1,425	71
KAO, 1985	95 (ГЖХ)	0,824–0,830	20/20	1,422–1,426	82
Firm., 1992	-	0,815–0,835	20/20	1,415–1,440	72
РФ, 1990	94 (оксим.)	~0,826	20/4	1,422–1,426	-

Получают дегидрированием нонилового спирта на специальных катализаторах.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.32. Дециловый альдегид

Деканаль, н-деканаль, каприновый альдегид, n-Decanal (Arc.833, Firm.), Aldehyde C-10 (RIFM, GIV, IFF, H.+R., BASF, KAO). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

CHO

C.A. 112-31-2

Содержится в ЭМ цитрусовых, хвойных и многих цветочных растений.

Запах — сильный, альдегидный, при разбавлении — апельсиновой корки. Жидкость, т. кип. 208–209°C/1013 гПа, 93–94°C/16 гПа, 60°C /1 гПа; P_{20} 0,13 гПа; γ_{20}29,9 дин/см; σ_{20}1,73 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50}33,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5,04 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (ГЖХ)	0,824–0,829	20/4	1,427–1,430	82
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,823–0,831	20/4	1,426–1,431	82
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,823–0,826	25/25	1,426–1,429	87
BASF, 1987	98 (ГЖХ)	0,823–0,832	25/25	1,426–1,430	90
KAO, 1985	95 (ГЖХ)	0,824–0,833	20/20	1,426–1,431	82
Firm., 1992	-	0,825–0,830	20/20	1,426–1,430	82
РФ, 1990	77 (оксим.)	0,830–0,840	20/4	1,430–1,435	86

Примечание: продукт, вырабатываемый в РФ, представляет собой смесь альдегидов C_9-C_{12}.

Дециловый альдегид получают дегидрированием децилового спирта на специальных катализаторах.

Используют в малых дозах (до 2%) в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

1.33. Ундециловый альдегид

Ундеканаль, н-ундеканаль, Undecanal (Arc. 3028), n-Undecanal (Firm.), Aldehyde C-11, undecylic (RIFM, GIV, IFF, H.+R., KAO), Aldehyd 11-11 (Henkel). $C_{11}H_{22}O$; 170,30

CHO

C.A. 112-44-7

Содержится в лимонном и мандариновом ЭМ.

Запах — альдегидный, восково-цветочный, свежести. Жидкость, т. кип. 117°C/24 гПа; $P_{20}5,3 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 30,4 дин/см; σ_{20}2,32 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (ГЖХ)	0,826–0,831	25/25	1,431–1,435	75
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,825–0,829	25/25	1,430–1,434	95
IFF, 1992	95(ГЖХ)	0,825–0,833	25/25	1,430–1,434	79
KAO, 1985	95(ГЖХ)	0,827–0,835	20/20	1,429–1,435	77
Firm., 1992	-	0,825–0,835	25/25	1,430–1,435	96
РФ, 1990	90 (оксим.)	~0,828	20/4	1,431–1,436	-

Продажный продукт Henkel (C.A. 68516-18-1) представляет собой смесь изо- и нормального альдегидов (d_{25}^{25} ~0,840; n_D^{20}1,434–1,436; т. всп. 86 °C).

Получают дегидрированием ундецилового спирта на специальных катализаторах.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.34. Лауриновый альдегид

Додециловый альдегид, н-додеканаль, Dodecanal (Arc. 1105), Aldehyde C-12, lauric (RIFM GIV, H.+R., KAO, IFF). $C_{12}H_{24}O$; 184,32

CHO

C.A. 112-54-9

Содержится в ЭМ цитрусовых и некоторых хвойных растений.

Запах — сильный, свежий, травянистый с цветочными нотами. Жидкость, т. пл. 11 °C, т. кип. 185 °C /133гПа, 100 °C/4,7 гПа ; $P_{20}2,0 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50}23,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	92	0,826–0,831	25/25	1,433–1,438	>100
H.+R., 1988	98	0,826–0,830	25/25	1,434–1,437	>100
KAO, 1985	95	0,829–0,837	20/20	1,432–1,438	98
IFF, 1992	95	0,826–0,834	25/25	1,433–1,437	>100

Получают дегидрированием додецилового спирта на специальных катализаторах.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

Лауриновый альдегид склонен к полимеризации, особенно в присутствии следов кислот. Его тример имеет т. пл. 58 °С. Полимеризация ускоряется при температуре ниже 0 °С. В таре из алюминия полимеризация замедляется.

1.35. Тридециловый альдегид

Тридеканаль, Tridecanal (Arc. 2984), Aldehyd 13-13 (Henkel). $C_{13}H_{26}O$, 198,35

С.А. 10486-19-8

CHO

Содержится в лимонном ЭМ, огурцах.

Запах н-тридеканаля характеризуется как восковый, отчасти цитрусовый. Жидкость, т. кип. 251 °С/1013 гПа, 128 °С/13 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel, — oral LD_{50} >5 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel (С.А. 68527-06-0) представляет собой смесь н- и изо-тридеканаля. Он содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров тридеканаля и имеет d_{25}^{25} ~0,827; n_D^{20} 1,436–1,438; т. всп. 104 °С.

Один из возможных методов получения — гидроформилирование 1-додецена.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.36. Миристиновый альдегид

Тетрадеканаль, тетрадециловый альдегид, Myristic aldehyde (Arc. 2290), Aldehyde C-14, myristic (RIFM, GIV). $C_{14}H_{28}O$; 212,37

С.А. 124-25-4

CHO

Содержится в ЭМ камфарного дерева и др. Запах — мягкий, жирный с нотой ириса. Воскообразная масса, т. пл. 23 °С, т. кип. 155 °С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >10 г/кг.

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт должен содержать не менее 85% (оксим.) альдегида и иметь d_{25}^{25}0,825–0,835, n_D^{20} 1,438–1,445, т. всп.>100 °С.

Рекомендуется для использования в цветочных парфюмерных композициях. Склонен к полимеризации. Ограничений IFRA нет.

1.37. Метилгексилцетальдегид

2-Метилоктаналь, Methyl hexyl acetaldehyde (Arc. 2056, IFF), Methylhexylacetaldehyde (RIFM). $C_9H_{18}O$: 142,24

С.А. 7786-29-0

CHO

Запах — сильный альдегидно-цветочный, ноты апельсина, лилии. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,822–0,830; n_D^{20} 1,420–1,426; т. всп. 69 °С.

Один из возможных путей получения — взаимодействие метилгексилкетона с эфиром хлоруксусной кислоты по реакции Дарзана.

Может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.38. Метилоктилацетальдегид

2-Метилдеканаль, Methyl octyl acetaldehyde (Arc. 2145, RIFM), Aldehyde C-11, MOA (BASF, IFF, Firm.), Oranginal (H.+R.) $C_{11}H_{22}O$; 170,30

CHO

С.А. 19009-56-4

Запах — сильный, освежающий, при разбавлении — цитрусовый, цветочный. Жидкость, т. кип. 71 °C/1 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976):oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т.всп., °C
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,821-0,829	20/4	1,427–1,433	81
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,822–0,825	25/25	1,428–1,431	91
BASF, 1987	97 (ГЖХ)	0,822–0,826	25/25	1,429–1,430	82
Firm., 1992	-	0,820–0,830	20/20	1,425–1,435	79

Традиционный способ получения состоит во взаимодействии метилоктилкетона с эфиром хлоруксусной кислоты по реакции Дарзана.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.39. Метилнонилацетальдегид

2-Метилундеканаль, Methyl nonyl acetaldehyde (Arc. 2132), Aldehyde C-12, MNA (RIFM, GIV, IFF, H.+R., BASF, Firm.). $C_{12}H_{24}O$; 184,32

CHO

C. A. 110–41–8

Запах — сильный альдегидный с амбровой и цитрусово-травянистой нотами. Жидкость, т. кип. 232°C/1013 гПа, 114°C/13 гПа; γ_{20} 28,4 дин/см; σ_{20} 2,8 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >10 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	97 (ГЖХ)	0,824–0,830	25/25	1,431–1,435	80
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,822–0,830	25/25	1,430–1,434	90
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,824–0,827	25/25	1,431–1,434	104
BASF, 1987	95 (ГЖХ)	0,822–0,830	25/25	1,431–1,436	98
Firm., 1992	-	0,823–0,831	20/20	1,430–1,436	97
РФ, 1990	90 (оксим.)	~ 0,825	20/4	1,431–1,434	-

Традиционный метод получения состоит во взаимодействии метилнонилкетона с эфиром хлоруксусной кислоты по реакции Дарзана. Возможно также осуществить синтез, исходя из ундецилового спирта и метанола (Л. А. Шутикова и др., Масло-жировая пром-сть, 1970, № 9, с. 29; авт свид. 1595834, 14.07.88-30.09.90, РЖХ, 1991, 5Н35П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.40. Триметилгексаналь

3,5,5-Триметилгексаналь, 3,5,5-Trimethyl hexanal (Arc. 3006, RIFM), Vandor B (IFF), Verdinal (Quest). $C_9H_{18}O$; 142,24

CHO

C. A. 5435-64-3

Запах — очень сильный, зелени, альдегидный. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2,5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	90	0,818–0,826	20/4	1,419–1,424	48
Quest, 1989	–	~0,832	20/20	~1,432	55

Может быть получен гидроформилированием диизобутилена с последующей тщательной очисткой.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения обычно при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.41. Тетраметилгексаналь

2,3,5,5-Тетраметилгексаналь, Aldehyde TMH (Dragoco). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

CHO

Запах — свежий, альдегидный с нотами травы, цветов, свежей зелени. Жидкость.

Продажный продукт Dragoco содержит не менее 98% (оксим.) названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,830–0,837; n_D^{20} 1,427–1,433, т. всп. 66°C.

Может быть получен окислением или дегидрированием соответствующего спирта (Klein E., заявка ФРГ 2723636, 25.05.77–7.12.78, РЖХ, 1980, 4Р578П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.42. *транс*-2-Гексеналь

(E)-2-Гексеналь, *trans*-2-Hexenal (Arc. 1599, Bedouk.), Hexen-2-al (RIFM), Leaf aldehyde

$C_6H_{10}O$; 98,15

CHO

C. A. 6728-26-3

Содержится в ЭМ цитронеллы и камфарного дерева, а также в винограде, яблоках, клубнике и др.

Запах — сильный, резкий, при разбавлении — приятный запах зелени, фруктов. Жидкость, т. кип. 146°C/1013 гПа, 80°C/86 гПа, 43°C/16 гПа; d_4^{20} ~0,849, n_D^{20} ~1,448.

Известные методы получения продукта хорошего парфюмерного качества малопригодны для промышленного производства. По всей вероятности, *транс*-2-гексеналь производится на полузаводских установках.

Имеются проблемы предохранения альдегида от порчи за счет автоокисления. Поэтому в большинстве случаев используются растворы *транс*-2-гексеналя, которые вводятся в парфюмерные композиции и отдушки небольшими дозами. Ограничений IFRA нет. Весьма эффективно применение в пищевых ароматических эссенциях.

1.43. 2-Ноненаль

транс-2-Ноненаль, 2-Nonenal (Arc. 2356, RIFM, Bedouk.).

$C_9H_{16}O$; 140,23

CHO

C. A. 2463-53-8

Содержится в ирисовом ЭМ.

Запах — очень сильный, жирно-ирисовый, при разбавлении проявляются ноты цветов и зелени. Жидкость, т. кип. 99°C/16 гПа, d_4^{20} ~0,860; n_D^{20} ~1,454.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,7 г/кг (кролики). Получают, вероятно, в полузаводском масштабе.

Используют в небольших дозах в некоторых парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.44. 4-Деценаль

транс-4-Деценаль, Decenal-4-*trans* (GIV).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

CHO

C. A. 65405-70-1

Запах — альдегидный, сильный, при разбавлении проявляются ноты апельсина, зелени, цветов. Жидкость.

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 96% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,840–0,845; n_D^{20} 1,440–1,444; т. всп. 78°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.45. 9-Деценаль

9-Decenal (Quest).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

CHO

C. A. 39770-05-3

Запах — альдегидный с нотами свежести, фруктов, розы. Жидкость, т. кип. 97°C/13 гПа.

Продажный продукт Quest (1989) представляет собой 10%-ный раствор 9-деценаля в диэтилфталяте. Этот раствор имеет d_{20}^{20} ~ 1,082; n_D^{20} ~ 1,495; т. всп. 98°C.

Может быть получен окислением или каталитическим дегидрированием 9-деценола.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 0,7%. Ограничений IFRA нет.

1.46. Ундециленовый альдегид (смесь изомеров)

Ундеценаль — смесь изомеров, Undecenal (mixed isomers) (Arc. 3036), Undecylenic aldehyde, mixed isomers (RIFM), Aldehyde iso C-11 (GIV), Intereleven aldehyde (IFF).

$C_{11}H_{20}O$; 168,28

CHO

С. А 1337-83-3

Запах — очень сильный, альдегидный, ноты розы, апельсина. Жидкость, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ, сумма изомеров),%	d_4^{20}	n_D^{20}	Т.всп., °С
IFF, 1992	95	0,841–0,849	1,442–1,447	79
GIV, 1987	95	0,842–0,850	1,442–1,447	79

Может быть получен дегидрированием или окислением смеси ундециленовых спиртов.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.47. 10-Ундеценаль

Ундециленовый альдегид, 10-Undecen-1-al (Arc. 3035), Aldehyde C-11, undecylenic (RIFM, GIV, H.+R., IFF).

$C_{11}H_{20}O$; 168,28

CHO

С. А. 112-45-8

Запах — сильный, альдегидный с нотами розы, воска, цитрусов. Жидкость, т. кип. 235°С/1013 гПа, 103°С/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т.всп., °С
GIV, 1984	93 (ГЖХ)	0,841–0,845	25/25	1,441–1,446	76
H.+R., 1988	95 (оксим.)	0,840–0,844	25/25	1,441–1,445	100
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,841–0,849	20/4	1,440–1,445	100

Может быть получен из ундециленовой кислоты при взаимодействии с муравьиной кислотой и метанолом в паровой фазе с использованием в качестве катализатора карбоната марганца.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.48. 3-Додеценаль

(E)- и (Z)-3-Додецен-1-аль, Aldehyde mandarine 10% citr. (Firm.).

$C_{12}H_{22}O$; 182,31

CHO

С. А. 68083-57-8

Запах — альдегидный, цитрусово-травянистый. Жидкость. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Продажный продукт Firm (1983, 1992) представляет собой 10%-ный раствор 3-додеценаля в триэтилцитрате, причем, по данным каталога 1983 г., содержание альдегида по результатам оксимирования может составлять минимум 6,5%. Этот раствор имеет d_{20}^{20} 1,098–1,108, n_D^{20} 1,441–1,448, т. всп. >100°С, стабилизирован добавками ионола и бутилгидроксианизола.

Продукт рекомендуется для использования в парфюмерных композициях. Недостаточно устойчив в мыле и синтетических моющих средствах. Ограничений IFRA нет.

6 5414

1.49. Диметилгептеналь

2,6-Диметил-5-гептеналь, 2,6-Dimethyl-2-heptenal-(7) (Arc. 1011), Dimethylheptenal (RIFM), Melonal (GIV, Dragoco). $C_9H_{16}O$; 140,23

С. А. 106-72-9

Запах — сильный, освежающий, фруктовый (дыни). Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	85 (оксим.)	0,845–0,855	25/25	1,441–1,447	63
Dragoco	85 (ГЖХ)	0,850–0,860	20/4	1,440–1,450	68

Может быть получен по реакции Дарзана из метилгептенона и эфира хлоруксусной кислоты.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.50. Травеаль

2,2,5-Триметил-4-гексеналь, 2-метил-2-пренилпропионовый альдегид, Traveal (РФ). $C_9H_{16}O$; 140,23

Запах — сильный, травы и свежей зелени. Жидкость, т. кип. 65-66°С/27 гПа; P_{20} 0,8 гПа.

Продукт, получаемый ВНИИСНДВ, содержит ~97% названного альдегида и имеет d_4^{20} ~0,851; n_D^{20} 1,439–1,441.

Получают взаимодействием диметилвинилкарбинола с изомасляным альдегидом в присутствии кислого катализатора. Возможен синтез алкилированием изомасляного альдегида пренилхлоридом в среде щелочи с катализатором фазового переноса.

Может быть использован как полупродукт синтеза душистых веществ, а также в качестве компонента парфюмерных композиций.

1.51. Ирисаль

2-Этил-2-бутил-5-метил-4-гексеналь, 2-метил-5-формил-5-этил-2-нонен, Irisal (РФ). $C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах — сильный, типа ириса с жирным оттенком. Жидкость, т. кип. 80-83°С/2,7 гПа, 67°С/0,5 гПа; $P_{20}\,1,6 \cdot 10^{-2}$ гПа, d_4^{20} ~0,871.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 93% (оксим.) названного альдегида и имеет n_D^{20} 1,453–1,456.

Промышленный способ синтеза состоит во взаимодействии 2-этилгексаналя с диметилвинилкарбинолом в присутствии кислых катализаторов (С. А. Войткевич и др., авт. свид. 355147, 25.06.70–16.10.72)

OH + CHO —[H⁺]→ CHO

Позже были опубликованы варианты синтеза ирисаля алкилированием 2-этил-гексаналя пренилгалогенидами (Dietl H. K., Brannock K. C., Tetrahedron Lett. 1973, № 15, 1273; Groenewegen P. и др., Tetrahedron Lett. 1978, № 5, 491, РЖХ, 1978, 13Ж112).

Используют ирисаль в парфюмерных композициях и отдушках.

1.52. Нонадиеналь

(2E, 6Z)-Нонадиеналь, Nonadienal (Arc. 2339, RIFM), (E, Z)-2,6-Nonadienal (Bedouk.), Violett leaf aldehyde, Cucumber aldehyde. $C_9H_{14}O$; 138,21

С. А. 557-48-2

Содержится в ЭМ листьев фиалки.

Запах — очень сильный, зелени, ноты фиалки, огурца. Жидкость, т. кип. 89-90°C/16 гПа; d_4^{20} ~0,866; n_D^{20} ~1,470.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Известные методы получения носят препаративный характер и базируются на использовании (3Z)-гексенола.

Продукт очень дорог. Используется в микродозах в некоторых парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.53. Диметилгептадиеналь

2,4-Диметил-2,6-гептадиеналь, Dimedienal (Wacker). $C_9H_{14}O$; 138,21

CHO

Запах — сильный, альдегидный, цитрусово-травянистый. Жидкость, т. кип. 88°C, смесь изомеров.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~95% (ГЖХ) смеси изомеров названного альдегида и имеет d_{20}^{20} ~0,864, n_D^{20} 1,465–1,475, т. всп. 65°C.

Получают алкилированием 2-метил-2-пентеналя хлористым аллилом и последующей термической перегруппировкой (Gebauer H., заявка ФРГ 3341606, 17.11.83–30.06.85, РЖХ, 1986, 6Р586П).

Cl; NaOH, КФП; CHO; CHO; CHO

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.54. Диэтилгептадиеналь

2,4-Диэтил-2,6-гептадиеналь, Diedienal (Wacker). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

CHO

Запах — свежий, травянистый с оттенком запаха корней ангелики. Жидкость, т. кип. 92°C/13 гПа, смесь изомеров.

Продажиный продукт Wacker (1987) содержит ~97% (ГЖХ) смеси изомеров диэтилгептадиеналя и имеет d_{20}^{20} ~0,865; n_D^{20} 1,465–1,475; т. всп. 79°C.

Получают кротоновой конденсацией масляного альдегида, последующим алкилированием продукта конденсации хлористым аллилом и далее — термической перегруппировкой (Gebauer H., Mehlin H., заявка ФРГ 3341604, 17.11.83–3.05.84, РЖХ, 1986, 4Н31П).

Cl; NaOH, КФП; CHO; CHO; CHO

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.55. Диметилацеталь гептаналя

1,1-Диметоксигептан, Heptanal dimethylacetal (Arc. 1496), Aldehyde C-7 dimethyl acetal (RIFM, Miltitz). $C_9H_{20}O_2$; 160,26

OCH_3; OCH_3

C. A. 10032-05-1

Запах — резкий, травы, зелени, резеды, с жирным оттенком. Жидкость, т. кип. 180°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажиный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{20}^{20} 0,845–0,855; n_D^{20} 1,409–1,415; т. всп. 65°C

Получают ацетализацией гептаналя метанолом в присутствии кислотных катализаторов.

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.56. Диметилацеталь октаналя

1,1-Диметоксиоктан, Octanal dimethylacetal (Arc. 2399), Octacetal (IFF), Resedyl acetal (Dragoco). $C_{10}H_{22}O_2$; 174,29

OCH_3; OCH_3

C. A. 10022-28-3

Запах — сильный, зелени, воска, цитрусов. Жидкость, т. кип. 185°C/1013 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	0,844–0,852	1,414–1,418	76
Dragoco	95	0,845–0,850	1,415–1,419	81

Может быть получен ацетализацией октаналя метанолом в присутствии газообразного хлористого водорода.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

1.57. Диметилацеталь деканаля

1,1-Диметоксидекан, Decanal dimethylacetal (Arc. 835, RIFM), Aldehyde C-10 dimethylacetal (Miltitz). $C_{12}H_{26}O_2$; 202,34

OCH₃ … OCH₃

C. A. 7779–41–1

Запах — воска, зелени, ноты цитрусов, коньяка. Жидкость, т. кип. 218°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{20}^{20} 0,849–0,851; n_D^{20} 1,424–1,426; т. всп. 107°.

Получают ацетализацией децилового альдегида метанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.58. Этиленгликольацеталь гептаналя

1-Гексил-1,3-диоксолан, 2-Hexyl-1,3-dioxolane (Arc. 1660), Aldehyde C-7 glycolacetal (Miltitz), Citrotone B (IFF), Ylamone (Dragoco) $C_9H_{18}O_2$; 158,24

C. A. 1708–34–5

Запах — резкий, травянисто-фруктовый с жирной нотой. Жидкость, т. кип. 98–100°C/35 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	95	0,910–0,918	20/4	1,428–1,432	77
Dragoco	95	0,910–0,914	20/4	1,429–1,433	79
Miltitz, 1992	98	0,913–0,919	20/20	1,429–1,434	74

Получают взаимодействием гептаналя с этиленгликолем при отгонке образующейся воды. Наличие остатков гептаналя портит запах продукта.

Используют в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

1.59. Этиленгликольацеталь октаналя

2-Гептил-1,3-диоксолан, Cyclooctal (IFF). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 4359–57–3

Запах — резкий, свежий с цитрусовой нотой. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{25}^{25} 0,901–0,909; n_D^{20} 1,431–1,436; т. всп. 86°C.

Получают ацетализацией октаналя этиленгликолем в присутствии кислотных катализаторов при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.60. Этиленгликольацеталь 2-этилгексаналя

2-(1-Этилпентил)-1,3-диоксолан, Syvertal, Vertenol (IFF), Greenoxane (Quest), Abbavert (BBA), Petasal (Miltitz). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 4359–47–1

Запах — овощной, зелени, ноты хризантемы, гардении. Жидкость, т. кип. 77–78°C/13 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	0,910–0,918	20/4	1,433–1,439	74
BBA, 1990	98	~0,913	20/20	~1,436	74
Miltitz, 1991	98	0,910–0,918	20/20	1,432–1,439	74

Получают ацетализацией 2-этилгексаналя этиленгликолем в присутствии кислотного катализатора при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.61. 2-Бутен-1,4-диолацеталь 2-этилбутаналя

4,7-Дигидро-2-(3-пентил)-1,3-диоксепин, Karotine (GIV). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

С. А. 53338-06-0

Запах — сильный, зелени, растений. Жидкость, т. кип. 47°C/1,3 гПа.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_4^{20} 0,951–0,961; n_D^{20} 1,454–1,460; т. всп. 82°C.

Получают ацетализацией 2-этилбутаналя 2-бутен-1,4-диолом в присутствии *пара*-толуолсульфокислоты (Tavares R. F. и др., пат. США 3953614, 15.05.74–27.04.76, РЖХ, 1976, 24Р485П).

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и косметических изделий при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.62. Диацетат гептаналя

1,1,-Диацетоксигептан, Fantesal (Dragoco). $C_{11}H_{20}O_4$; 216,28

Запах — очень сильный, морских водорослей. Жидкость.

Продажный продукт Dragoco (1990) содержит не менее 95% (ГЖХ) диацетата и имеет d_4^{20} 0,968–0,978; n_D^{20} 1,417–1,427; т. всп. > 110°C.

Может быть получен ацетилированием гептаналя при действии уксусного ангидрида.

Используют главным образом в отдушках для синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.63. Диметилацеталь травеаля

1,1-Диметокси-2,2,5-триметил-4-гексен, Methylpampelmousse (Roure), Amarocit (Wacker). $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

Запах — свежий, фруктовый с нотой грейпфрута. Жидкость, т. кип. 82°C/16 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание (ГЖХ), %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Roure	—	~0,877	~1,441	83
Wacker, 1987	99	~0,877	1,437–1,442	52

Может быть получен ацетализацией травеаля метанолом.

Используют в парфюмериых композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.64. Этилгексилацеталь ацетальдегида

1-Этокси-1-гексоксиэтан, Lilivert (BBA). $C_{10}H_{22}O_2$; 174,29

С. А. 54484-73-0

Запах — натуральной зелени, цветочный с оттенком запаха грибов. Жидкость.

Продажный продукт BBA (1990) содержит ~ 98% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{20}^{20} ~0,832; n_D^{20} ~1,412; т. всп. 66°С.

Может быть получен переацетализацией диэтилацеталя ацетальдегида (Wagner H. R. и др., англ. пат. 1497037, 7.09.73–5.01.78, РЖХ, 1978, 14Р618П).

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

1.65. Этил-*цис*-3-гексенилацеталь ацетальдегида

1-Этокси-1-*цис*-3-гексенокснэтан, 1-этокси-3(Z)-гексенокснэтан, Acetaldehyde ethyl-*cis*-3-hexenyl acetal (Arc. 10, RIFM), Leaf acetal extra (IFF). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 28069-74-1

Запах — сильный, зелени, листьев фиалки. Жидкость. Содержит некоторое количество (E)-изомера.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) имеет d_4^{20} 0,849–0,857; n_D^{20} 1,420–1,426; т. всп. 69°С.

Может быть получен переацетализацией диэтилацеталя ацетальдегида *цис*-3-гексенолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.66–1.78. КЕТОНЫ И КЕТАЛИ

1.66. Диацетил

2,3-Бутандион, Diacetyl (Arc. 872, RIFM, H.+R., BASF, BBA). $C_4H_6O_2$; 86,09

C. A. 431-03-8

В небольших количествах содержится во многих ЭМ. Часто образуется при гидродистилляции растительного сырья и содержится в дистилляционных водах.

Запах — очень сильный, резкий, при разбавлении — запах сливочного масла. Жидкость, т. кип. 88°С/1013 гПа; т. заст. — 4°С. Растворим в воде (1:4).

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98 (оксим.)	0,978–0,984	25/25	1,392–1,396	15
BASF, 1987	97 (ГЖХ)	0,979–0,985	25/25	1,393–1,397	6,5
BBA, 1990	97 (ГЖХ)	0,979–0,985	20/20	1,393–1,397	10

Может быть получен каталитическим дегидрированием 2,3-бутандиола.

Используют главным образом в пищевых ароматических эссенциях, в частности для отдушивания маргарина. В парфюмерных композициях применяют редко, в микродозах. Ограничений IFRA нет.

1.67. Ацетоин

3-Гидрокси-2-бутанон, Acetyl. methyl carbinol (Arc. 43, H.+R.), Acetoin (RIFM, BASF). $C_4H_8O_2$; 88,10

C. A. 52217-02-4; 513-86-0

Содержится в сливочном масле, какао, вине, землянике.

Запах — приятный, сливочного масла, сливок. Жидкость, т. кип. 143°С/1013 гПа, может димеризоваться с образованием кристаллического димера. Растворим в воде.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт H.+R. представляет собой димер ацетоина с т. пл.≥80°С, т. всп. ~50°С. Чистота, по данным ГЖХ, составляет минимум 97%.

BASF (1988) вырабатывает мономерный продукт, который содержит не менее 97% (ГЖХ) ацетоина и имеет d_{25}^{25} 0,995–1,019; n_D^{20} 1,417–1,423; т. всп. 47,5°С.

Используют главным образом в пищевых ароматических эссенциях и лишь изредка в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

1.68. 2-Октанон

Метилгексилкетон, Methyl hexyl ketone (Arc. 2066, RIFM). $C_8H_{16}O$; 128,22

C. A. 111-13-7

Содержится в рутовом ЭМ, бананах.

Запах — цветочно-травянистый, ноты резеды, тмина. Жидкость, т. кип. 175 °С/1013 гПа, 59–60 °С/15 гПа; d_4^{20}0,819; n_D^{20}1,415.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики). Может быть получен окислением 2-октанола.

Рекомендуется использовать в составе парфюмерных композиций и искусственных ЭМ (Morel Ch., Soap, perfum. cosmet. 1953, **26**, № 11, 1144).

1.69. 3-Октанон

Этиламилкетон, Ethyl amyl ketone (Arc. 1148, RIFM, GIV), Octanone-3 (Hüls). $C_8H_{16}O$; 128,22

C. A. 106-68-3

Содержится в лавандовом, лавандиновом и других ЭМ.

Запах — резкий, травянисто-фруктовый, напоминает запах начальной ноты лавандового масла. Жидкость, т. кип. 170 °С/1013 гПа, 76–77 °С/40 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98 (оксим.)	0,817–0,821	25/25	1,413–1,417	50
Hüls, 1990	98 (ГЖХ)	~0,822	20/4	—	46

Может быть получен окислением или дегидрированием 3-октанола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.70. Метилгептенон

6-Метил-5-гептен-2-он, 2-Methylheptenone (Arc. 2043), Methyl heptenone (RIFM, GIV), Methylheptenon (BASF). $C_8H_{14}O$; 126,20

C. A. 110-93-0
409-02-9

Содержится в цитронелловом, лимонном, пальмарозовом и других ЭМ.

Запах — сильный, маслянистый, свежей зелени с цитрусовой нотой. Жидкость, т. кип. 173–174 °С/1013 гПа, 108 °С/133 гПа, 59 °С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 4,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	98	0,848–0,854	1,439–1,443	56
BASF, 1987	98	0,846–0,851	1,438–1,442	56

Технический метилгептенон является полупродуктом синтеза дегидролиналоола, а следовательно, линалоола, цитраля и витаминов А и Е. Он вырабатывается десятками тысяч тонн, исходя или из пренилхлорида и ацетона, или из диметилвинилкарбинола.

Парфюмерный метилгептенон используется в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.71. 2-Нонанон

Метилгептилкетон, Methyl heptyl ketone (Arc. 2052), Nonanone-2 (Hüls). $C_9H_{18}O$; 142,24

C. A. 821-55-6

Содержится в рутовом, гвоздичном и некоторых других ЭМ.

Запах — фруктовый с жирной и травянистой нотами. Жидкость, т. кип. 194 °C/1013 гПа, 75–77 °C/16 гПа, n_D^{20} 1,421.

Острая токсичность, по данным Merck (1992), — oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы).

Продажный продукт Hüls (1990) содержит ≥98% (ГЖХ) 2-нонанона и имеет d_4^{20} ~0,821; т.всп. 76 °C. Ограничений IFRA нет.

1.72. 2-Ундеканон

Метилнонилкетон, Methyl nonyl ketone (Arc. 2140, RIFM, GIV). $C_{11}H_{22}O$; 170,30

C. A. 112-12-9

Содержится в рутовом и других ЭМ.

Запах — жирный, травянистый с цитрусовой нотой. Жидкость, т. пл. 13,5 °C, т. кип. 232 °C/1013 гПа, 95–98 °C/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) парфюмерный продукт должен содержать не менее 90% (оксим.) названного кетона и иметь т. пл. ≥10 °C; d_{25}^{25} 0,822–0,826; n_D^{20} 1,428–1,433; т.всп. 90 °C.

Традиционный метод получения состоит в выделении из рутового ЭМ фракционированной дистилляцией. Один из способов синтеза заключается в радикальном присоединении ацетона к 1-октену.

Технический 2-ундеканон используют для синтеза метилнонилацетальдегида. Парфюмерный продукт применяют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.73. Диметилоктенон

2,5-Диметил-2-октен-6-он, Dimethyl octenone (GIV). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 2550-11-0

Запах — цитрусовый, свежий, фруктовый. Жидкость.

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,845–0,850; n_D^{20} 1,441–1,444; т. всп. 68 °C.

Может быть получен алкилированием диэтилкетона пренилхлоридом в присутствии катализатора фазового переноса или другими способами, подобными методам синтеза метилгептенона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.74. Ацетилдиизоамилен

3,4,5,6,6-Пентаметил-3-гептен-2-он и изомеры, Koavone (IFF). $C_{12}H_{22}O$; 182,31

C. A. 81786-73-4

Запах — древесно-цветочный с амбровой нотой и мятным оттенком. Жидкость, т. кип. 60–61 °C/1,3 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral LD_{50} ~4,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 85% (ГЖХ) суммы изомерных кетонов и имеет d_4^{20} 0,862–0,871; n_D^{20}1,453–1,461; т. всп. 86 °C. Получают ацетилированием диизоамилена уксусным ангидридом (Boden R. M., пат. США 4346237, 8.05.81–24.08.82, РЖХ, 1983, 17P530П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

1.75. 2-Ацетилоктанол

3-Гидроксиметил-2-нонанон, Methyl lavender ketone (IFF). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 821-55-6

Запах — резкий, травянистый с нотой лаванды. Жидкость. Смесь изомеров, содержит также метилгептилкетон.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 60% (ГЖХ) гидроксикетона с примесями до 30% кетона и до 5% продукта дегидратации.

Может быть получен взаимодействием метилгептилкетона с формальдегидом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

1.76. 2-Бутен-1,4-диолкеталь метилгептанона

4,7-Дигидро-2-изогексил-2-метилдиоксепин, Ambersage (GIV) — $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

С. А. 53338-05-9

Запах — свежий, фруктово-цветочный, ноты лаванды, цитрусов. Жидкость.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного кеталя и имеет d_4^{20} 0,934–0,944; n_D^{20} 1,450–1,456; т. всп. 86 °С.

Получают из 6-метилгептан-2-она и 2-бутен-1,4-диола (Tavares R. E. и др., пат. США 3822290, 15.03.73–2.07.74, РЖХ, 1975, 10Р498П).

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.77. Этиленгликолькеталь ацетоуксусного эфира

Этил-2-метил-1,3-диоксолан-2-ацетат, Ethyl-2-methyl-1,3-dioxolane-2-acetate (Arc. 1294), Ethyl acetoacetate ethylene glycol ketal (RIFM), Fructone (IFF), Applinal (Quest), Frutinal (Roure), Ethylfruitat (Henkel), Methyldioxolan (Wacker), Fragolan (Miltitz), Jasmaprunat (H.+R.). — $C_8H_{14}O_4$, 174,20

С. А. 6413-10-1

Запах — фруктовый, ноты яблок, сливы, черники. Жидкость т. кип. 125 °С/67 гПа, 99–101 °С/23 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы) derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,083-1,091	25/25	1,431-1,435	93
Quest, 1989	98 (ГЖХ)	1,080-1,086	20/20	1,430-1,436	92
Roure	—	1,085-1,090	20/20	1,432-1,434	101
H.+R., 1988	98 (омыл.)	1,081-1,085	25/25	1,431-1,435	>100
Wacker, 1987	~98 (ГЖХ)	~1,081	20/20	1,430-1,434	75
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	1,080-1,095	20/20	1,428-1,438	95

Получают взаимодействием раствора ацетоуксусного эфира с этиленгликолем при кипячении с кислым катализатором при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

1.78. Пропиленгликолькеталь ацетоуксусного эфира

Этил-2,4-диметил-1,3-диоксолан-2-ацетат, Ethyl-2,4-dimethyl-1,3-dioxolane-2-acetate (Arc. 1210), Fraistone (IFF), Dimethyldioxolan (Wacker), Methylfragolan (Miltitz). — $C_9H_{16}O_4$; 188,23

С.А. 6290-17-1

Запах — свежий фруктовый, ноты яблок, земляники. Жидкость, т. кип. 109–111 °С/27 гПа. Смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97	1,038-1,046	25/25	1,425-1,430	91
Wacker, 1987	~98	~1,038	20/20	1,425-1,429	65
Miltitz, 1991	98	1,036-1,045	20/20	1,425-1,433	65

Получают кипячением раствора ацетоуксусного эфира с 1,2-пропиленгликолем и кислым катализатором при азеотропном удалении образующейся воды.

8-5414

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

1.79-1.169. СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ

1.79. *цис*-3-Гексенилформиат

(3Z)-Гексенилформиат, *cis*-3-Hexehyl formate (Arc. 1620, RIFM, Bedouk). $C_7H_{12}O_2$; 128,18



С. А. 33467-73-1

Содержится в чае.

Запах — зелени, фруктов, оттенок жасмина. Жидкость, т. кип. 155°С/1013 гПа, 85°С/100 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы); derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

По данным Bedouk. (1986), чистый продукт имеет d_{25}^{25} 0,90 n_D^{20} 1,427.

Получают этерификацией муравьиной кислоты *цис*-3-гексенолом. Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.80. Этилацетат

Этиловый эфир уксусной кислоты, Ethyl acetate (Arc. 1137, RIFM, BBA). $C_4H_8O_2$; 88,11

С. А. 141-78-6

Содержится в ЭМ японской мяты, во многих фруктах и ягодах.

Запах — сильный, эфирно-фруктовый. Жидкость, т. кип. 77°С; γ_{20} 23,95 дин/см. Растворимость в воде ~ 8%.

Острая токсичность по RIFM (1974) — oral LD_{50} 5,6 г/кг (крысы)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,898-0,901	20/20	1,372-1,375	-5
РФ, 1990	93 (омыл.)	0,901-0,905	20/4	~1,372	-

Примечание: этилацетат, вырабатываемый в РФ, содержит до 7% этилового спирта.

Получают этерификацией уксусной кислоты этиловым спиртом.

В парфюмерных композициях и отдушках используется довольно редко. В больших количествах применяется для создания пищевых ароматических эссенций.

1.81. Пропилацетат

Пропиловый эфир уксусной кислоты, n-Propyl acetate (Arc. 2657). $C_5H_{10}O_2$; 102,14

С. А. 109-60-4

Содержится в землянике.

Запах — свежий, эфирно-фруктовый, груши. Жидкость, т. кип. 101,6°С/1013 гПа; γ_{20} 24,68 дин/см; d_4^{20} ~ 0,887. Растворимость в воде ~ 2%.

Острая токсичность, по данным Merck (1992), — oral LD_{50} 9,37 г/кг (крысы).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ, содержит не менее 97% (омыл.) сложного эфира и имеет n_D^{20} 1,383-1,385; т. всп. 14°С.

Получают этерификацией уксусной кислоты пропиловым спиртом.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Основное применение — пищевые ароматические эссенции.

1.82. Бутилацетат

Бутиловый эфир уксусной кислоты, n-Butyl acetate (Arc. 382), Butyl acetate (RIFM). $C_6H_{12}O_2$; 116,16

С. А. 123-86-4

Содержится во многих овощах, фруктах и ягодах.

Запах — резкий эфирно-фруктовый, при разведении — приятный, ананаса, банана. Жидкость, т. кип. 126°C/1013 гПа, $d_4^{20} \sim 0,880$, n_D^{20} 1,394, γ_{20} 25,2 дин/см, т. всп. 29°C.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 14 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Получают этерификацией уксусной кислоты бутанолом при отгонке азеотропа бутанол — вода — уксусная кислота на ректификационной колонне или методом переэтерификации метилацетата бутанолом (Патласов В. П. и др., авт. свид. 1143740, 17.06.83-7.03.85, РЖХ, 1985, 17Н58П, авт. свид. 887561, 17.12.79-7.12.81 РЖХ, 1983, 4Н59П).

Используют в некоторых отдушках и главным образом в пищевых ароматических эссенциях.

1.83. Изобутилацетат

Изобутиловый эфир уксусной кислоты, iso-Butyl acetate (Arc. 383), Isobutyl acetate (RIFM), Isobutylacetat (Miltitz). $C_6H_{12}O_2$; 116,16

С. А. 110-19-0

Содержится во многих фруктах и ягодах.

Запах — эфирный, фруктовый. Жидкость, т. кип. 117°C/1013 гПа; γ_{20} 23,7 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 15 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (ГЖХ) изобутилацетата и имеет d_{20}^{20} 0,872-0,875; n_D^{20} 1,389-1,392; т. всп. 18°C.

Получают этерификацией уксусной кислоты изобутиловым спиртом при отгонке образующейся воды в виде азеотропа с изобутанолом и уксусной кислотой.

Используют в отдушках для синтетических моющих средств при дозировке до 4%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.84. Изоамилацетат

Изоамиловый эфир уксусной кислоты, iso-Amyl acetate (Arc. 119, BASF), Isoamyl acetate (RIFM, H.+R.), "Amyl acetate" — устаревшее название $C_7H_{14}O_2$; 130,19

С. А. 123-92-2

Содержится во многих фруктах и ягодах.

Запах — сильный, фруктовый, при разбавлении — ноты банана, груши, яблока. Жидкость, т. кип. 142°C; γ_{20} 24,8 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	97 (омыл.)	0,869-0,875	25/25	1,400-1,403	36
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,868-0,878	25/25	1,400-1,404	36
BBA, 1985	99 (омыл.)	0,870-0,874	20/20	1,400-1,404	32
РФ, 1990	98 (омыл.)	0,872-0,876	20/4	~1,403	36

Традиционный способ получения состоит в этерификации уксусной кислоты изоамиловым спиртом, выделяемым из "сивушного масла" — отхода производства этилового спирта методом брожения. Обычно такой изоамиловый спирт содержит примесь 2-метилбутанола, который образует 2-метилбутилацетат (С. А. 624-41-9).

Используют в отдушках для мыла и синтетических моющих средств, а также (сотни тонн) для пищевых ароматических эссенций. Ограничений IFRA нет.

1.85. Гексилацетат

Гексиловый эфир уксусной кислоты, Hexyl acetate (Arc. 1636, RIFM, IFF), Hexylacetat (Miltitz). $C_8H_{16}O_2$; 144,22

С. А. 142-92-7

Содержится в лавандиновом ЭМ, а также в землянике и других ягодах.

Запах — сладкий, фруктовый, ноты груши, ананаса, яблока. Жидкость, т. кип. 171,5°C/1013 гПа; 61,5°C/16 гПа; γ_{20} 26,5 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 6,16 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,868–0,876	25/25	1,406–1,411	56
Miltitz, 1992	95 (ГЖХ)	0,870–0,878	20/20	1,407–1,410	41
РФ, 1990	95 (омыл)	~ 0,875	20/4	1,408–1,412	–

Получают этерификацией уксусной кислоты гексанолом. Один из вариантов этерификации предусматривает использование в качестве катализатора катионита, а в качестве азеотропообразователя — смеси циклогексан — этилацетат (Беспрозванный М. А. и др., авт. свид. 1505925, 8.06.87–7.09.89, РЖХ, 1990, 7Н106П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.86. Октилацетат

Октиловый эфир уксусной кислоты, n-Octyl acetate (Arc. 2408), Acetate C-8 (RIFM, GIV), Octylacetat (Miltitz). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 112-14-4

Содержится в ЭМ цитрусовых, а также в яблоках и некоторых других фруктах.

Запах — фруктовый с нотами воска, травы. Жидкость, т. кип. 211,5°С/1013 гПа, 102°С/24 гПа; γ_{20} 27,8 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98 (омыл)	0,865–0,868	25/25	1,418–1,421	85
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	0,865–0,871	20/20	1,417–1,421	86

Получают этерификацией уксусной кислоты октиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.87. Изооктилацетат

2-Этилгексилацетат, 2-Ethyl hexyl acetate (Arc. 1262, RIFM). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 103-09-3

Запах — фруктовый с жирной и цветочной нотами. Жидкость, т. кип. 199°С/1013 гПа, 110,5°С/69 гПа, 78°С/11 гПа; d_4^{20}0,872; n_D^{20}1,420.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики). Вырабатываемый ранее в РФ продукт содержал не менее 98% (омыл.) изооктилацетата и имел n_D^{20} 1,419–1,422.

Получают этерификацией уксусной кислоты 2-этилгексанолом.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

1.88. Нонилацетат

Нониловый эфир уксусной кислоты, Nonyl acetate (Arc. 2363), n-Nonyl acetate (IFF), Acetate C-9 (RIFM, GIV). $C_{11}H_{22}O_2$; 186.30

C. A. 143-13-5

Запах — свежий, фруктово-цветочный. Жидкость, т. кип. 208–212°С/1013 гПа, 100–102°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	97 (омыл.)	0,864–0,868	1,422–1,426	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,862–0,870	1,421–1,425	>100

Получают этерификацией уксусной кислоты нониловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в некоторых пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.89. Децилацетат

Дециловый эфир уксусной кислоты, Decyl acetate (Arc. 848, H.+ R.), Acetate C-10 (RIFM, GIV). $C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

C. A. 112-17-4

Содержится в цитрусовых ЭМ.

Запах — свежий, фруктовый с цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 244°C/1013 гПа, 125,8°C/20 гПа; γ_{20} 28,7 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	0,862–0,866	1,425–1,430	>100
H.+R., 1988	98	0,861–0,865	1,426–1,429	125

Получают этерификацией дециловым спиртом уксусной кислоты или взаимодействием этого спирта с уксусным ангидридом.

Используется в виде небольших добавок в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.90. Додецилацетат

Лаурилацетат, n-Dodecyl acetate (Arc. 1113), Acetate C-12 (RIFM, GIV). $C_{14}H_{28}O_2$; 228,38

C. A. 112-66-3

Содержится в ЭМ *Ligusticum acutilobum*.

Запах — слабый восково-фруктовый, ноты цитрусов, розы. Жидкость, т. кип. 257°C/1013 гПа, 139–140°C/12 гПа; γ_{20} 29,1 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) товарный продукт должен содержать не менее 98% (омыл.) додецилацетата и иметь d_{25}^{25} 0,860–0,865; n_D^{20} 1,432–1,436; т. всп. >100°C.

Получают этерификацией уксусной кислоты додеканолом при удалении образующейся воды в виде азеотропа или ацетилированием додеканола уксусным ангидридом.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.91. 3,5,5-Триметилгексилацетат

3,5,5-Trimethyl hexylacetate (Arc. 3008, RIFM), Neononyl acetate (H.+R.), Nonanyl acetate (GIV), Vanoris (IFF), Inonyl acetate (Quest), Isononyl acetate (Hüls, H.+R., Miltitz). $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C. A. 58430-94-7

Запах — древесно-фруктовый, ноты лаванды, бергамота с жирным оттенком. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,25 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,860–0,870	25/25	1,419–1,424	80
H.+R., 1988 (Neononyl ac.)	98 (омыл.)	0,862–0,866	25/25	1,420–1,424	~71
H.+R., 1988 (Isononyl ac.*)	98 (омыл.)	0,875–0,883	25/25	1,426–1,431	92
GIV, 1986	98 (омыл.)	0,863–0,867	25/25	1,420–1,424	92
Hüls, 1990	95 (ГЖХ)	~ 0,867	20/4	-	~82
Miltitz, 1992	98 (омыл.)	0,872–0,882	20/20	1,425–1,429	~ 78

* С. А. 40379-24-6.

Получают ацетилированием 3,5,5-триметилгексанола, который изготавливается гидроформилированием диизобутилена и последующим гидрированием.

Используют в парфюмерных композициях и главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

1.92. Диизобутилкарбинилацетат

2,6-Диметилгепт-4-илацетат, Benzoflex (Roure), Diisobutyl carbinyl acetate. $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

С. А. 2504-50-0

Запах — фруктово-древесный с нотой розы. Жидкость, т. кип. 82°C/67 гПа.

В соответствии со спецификацией Roure (1964) продажный продукт должен иметь d_{20}^{20} 0,850–0,851; n_D^{20} 1,415–1,416.

Может быть получен исчерпывающим гидрированием форона и ацетилированием образовавшегося карбинола действием уксусного ангидрида:

H₂ → (CH₃CO)₂O →

В связи с реорганизацией предприятий Roure нет данных о продолжении производства этого продукта в настоящее время.

Прежде использовался в отдушках для мыла и синтетических моющих средств.

1.93. Пренилацетат

3-Метил-2-бутенилацетат, Prenyl acetate (Arc. 2641, RIFM, Ouest, IFF), Prenylacetate (Wacker) $C_7H_{12}O_2$; 128,18

С. А. 1191-16-8

Содержится в иланг-иланговом ЭМ, а также в малине и землянике.

Запах — свежий фруктовый, ноты банана, бергамота. Жидкость, т. кип. 151°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Wacker, 1987	~ 98	~ 0,920	1,428-1,432	38
Quest, 1989	95	0,915-0,925	1,427-1,434	50
IFF, 1992	97	0,914-0,922	1,427-1,431	49

Может быть получен взаимодействием пренилхлорида с ацетатом натрия.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.94. АИС

2,4-Диэтилоктилацетат, ацетат изододецилового спирта, 2,4-Diethyloctyl acetate. $C_{14}H_{28}O_2$; 228,37

Запах — мягкий цветочный с нотой зелени и древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 78°C/4 гПа; $d_4^{20} \sim 0,870$.

Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит 93–97% (ГЖХ) названного ацетата и имеет n_D^{20} 1,433–1,435.

Получают этерификацией уксусной кислоты 2,4-диэтилоктанолом (Войткевич С. А. и др., заявка на патент РФ № 5066554, 13.08.92).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%.

1.95. Метилгептенилацетат

6-Метил-5-гептен-2-илацетат, Methyl heptenyl acetate (Arc. 2044), Thracilene (Roure). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

Запах — свежий, ноты зелени, земли, грибов. Жидкость, т. кип. 65°C/13 гПа.

Продажный продукт Roure (1983) должен иметь $d_{20}^{20} \sim 0,885$; $n_D^{20} \sim 1,432$; т. всп. 82°C.

Получают селективным каталитическим гидрированием метилгептенона и ацетилированием образовавшегося спирта.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.96. *цис*-3-Гексенилацетат

(3Z)-Гексенилацетат, ацетат спирта листьев, cis-3-Hexenyl acetate (Arc. 1608, RIFM, Roure), Verdural extra (IFF). $C_8H_{14}O_2$; 142,20

С. А. 1708-82-3

Содержится во многих фруктах, в зеленом чае.

Запах — очень сильный, свежескошенной травы, листьев, недозрелых фруктов. Жидкость, т. кип. 86°C/53 гПа, 66°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,896-0,904	25/25	1,423-1,428	54
Roure	98 (омыл.)	~ 0,899	20/20	~ 1,426	67

Получают ацетилированием *цис*-3-гексенола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов. Дозировка обычно не превышает 1%, но даже микроколичество существенно влияет на запах композиций. Ограничений IFRA нет. Применяют также в пищевых ароматических эссенциях.

1.97. Ацетат октен-3-ола

1-Октен-3-илацетат, 3-ацетоксиоктен, амилвинилкарбинилацетат, Amyl vinyl carbinyl acetate (Arc. 232, RIFM, IFF), Krysalgene (Roure), Octenyl acetate (TAK). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

С. А. 2442-10-6

Содержится в лавандовом, лавандиновом и некоторых других ЭМ.

Запах — цветочно-травянистый, ноты лаванды и мяты. Жидкость, т. кип. 192°C/1013 гПа, 80°C/20 гПа, 61–62°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 0,85 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure, 1964	-	~0,878	20/20	~1,425	-
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,872-0,880	25/25	1,422-1,427	68
TAK, 1987	98 (ГЖХ)	0,870-0,883	25/25	1,420-1,428	69

Получают ацетилированием амилвинилкарбинола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Комиссия IFRA установила предельно допустимую концентрацию в композициях и отдушках 1,5%.

1.98. Деценилацетат

9-Децен-1-илацетат, Decenyl acetate (Arc. 846), 9-Decenyl acetate (RIFM), Roseate (IFF). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 50816-18-7

Запах — мягкий, воска и розы. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы изомеров деценилацетата, в том числе минимум 92% основного изомера, и имеет d_4^{20} 0,876-0,884; n_D^{20} 1,434-1,439; т. всп. > 100°С.

Получают ацетилированием 9-деценола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.99. Этилпропионат

Этиловый эфир пропионовой кислоты, Ethyl propionate (Arc. 1344, RIFM, BBA, H.+R.), Ethylpropionat (Miltitz). $C_5H_{10}O_2$; 102,14

С. А. 105-37-3

Содержится во многих фруктах.

Запах — сильный эфирно-фруктовый, ноты банана, ананаса. Жидкость, т. кип. 99°С/1013 гПа; γ_{20} 24,4 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 3,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,885-0,889	25/25	1,383-1,387	~ 12
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,888-0,891	20/20	1,383-1,386	5
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,886-0,891	20/20	1,382-1,386	5

Получают этерификацией пропионовой кислоты этиловым спиртом.

В парфюмерных композициях и отдушках используется сравнительно редко. Большое значение имеет для создания пищевых ароматических эссенций. Ограничений IFRA нет.

1.100. Бутилпропионат

Бутиловый эфир пропионовой кислоты, n-Butyl propinate (Arc. 519, RIFM). $C_7H_{14}O_2$; 130,19

С. А. 590-01-2

Содержится во многих ягодах и фруктах.

Запах — эфирно-фруктовый с грибным оттенком. Жидкость, т. кип. 146°С/1013 гПа; n_D^{20} 1,401; γ_{20} 25,3 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} 5,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 97% (омыл.) сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,874-0,878; т. всп. 32°С.

Получают этерификацией пропионовой кислоты бутанолом.

Используют главным образом в пищевых ароматических эссенциях и лишь иногда в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.101. Изоамилпропионат

Изоамиловый эфир пропионовой кислоты, iso-Amyl propionate (Arc. 213), Isoamyl propionate (RIFM), Isoamylpropionat (Miltitz), "Amyl propionate" (GIV, IFF, BBA).

$C_8H_{16}O_2$; 144,22

C. A. 105-68-0

Содержится в ЭМ перечной мяты и в какао-бобах.

Запах — сладкий, фруктовый, ноты абрикоса, ананаса. Жидкость, т. кип. 160°C/1013 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,865-0,869	25/25	1,406-1,409	47
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,865-0,873	25/25	1,404-1,408	41
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,869-0,873	20/20	1,406-1,409	40
Miltitz, 1992	98 (ГЖХ)	0,868-0,874	20/20	1,405-1,409	41

Получают этерификацией пропионовой кислоты изоамиловым спиртом, выделенным из сивушного масла — отхода производства этилового спирта брожением.

Используют в отдушках различного назначения и главным образом в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.102. Гексилпропионат

Гексиловый эфир пропионовой кислоты, n-Hexyl propionate (Arc. 1679), Hexyl propionate (RIFM, Roure), Hexylpropionat (Miltitz).

$C_9H_{18}O_2$; 158,24

C. A. 2445-76-3

Содержится в масле какао.

Запах — сладкий, фруктовый. Жидкость, т. кип. 190°C/1013 гПа, 60-61°C/7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Roure, 1990	99	0,869-0,874	1,411-1,415	81
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	0,868-0,874	1,412-1,415	60

Получают этерификацией пропионовой кислоты гексиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.103. *цис*-3-Гексенилпропионат

(3Z)-Гексенилпропионат, *cis*-3-Hexenyl propionate (Arc. 1625, RIFM, Bedouk.).

$C_9H_{16}O_2$; 156,23

C. A. 33467-74-2

Запах — сильный, свежей зелени, со слабым маслянистым оттенком. Жидкость, т. кип. 172°C/1013 гПа, 83°C/23 гПа; d_{25}^{25} 0,896; n_D^{20} 1,431.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт вырабатывается фирмой Bedouk., по всей вероятности, на полупроизводственных установках путем этерификации пропионовой кислоты *цис*-3-гексенолом.

Используют в парфюмерных композициях и дорогих отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.104. Деценилпропионат

9-Деценилпропионат, Decenyl propionate (Arc. 847), Ambronate (IFF).

$C_{13}H_{24}O_2$; 212,33

C. A. 68480-06-8

Запах — мягкий цветочный, розы с легким оттенком амбреттового масла. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров деценилпропионата, в том числе минимум 92% 9-деценилпропионата. Он имеет d_4^{20} 0,874-0,882; n_D^{20} 1,436-1,441; т. всп. > 100°С.

Получают этерификацией пропионовой кислоты 9-деценолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.105. Этилбутират

Этиловый эфир масляной кислоты, Ethyl butyrate (Arc. 1178, RIFM, IFF, BBA, H.+R., BASF), Ethylbutyrat (Miltitz).

$C_6H_{12}O_2$; 116,17

C. A. 105-54-4

Содержится во многих ягодах и фруктах.

Запах — сильный, эфирно-фруктовый, ноты банана, ананаса. Жидкость, т. кип. 121°С/1013 гПа; γ_{20} 24,6 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 13 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,874–0,882	25/25	1,390–1,394	24
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,876–0,879	20/20	1,391–1,394	25
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,874–0,879	25/25	1,392–1,395	26
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,870–0,877	25/25	1,391–1,394	18
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	0,878–0,883	20/20	1,392–1,395	32
РФ, 1990	97 (омыл.)	0,876–0,882	20/4	~1,392	—

Получают этерификацией масляной кислоты этиловым спиртом. Процесс может быть непрерывным (Берггрин Г. Э. и др. Хим. промсть, 1980, № 7, с. 441, РЖХ, 1980, 23Н45).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%, а также в пищевых ароматических эссенциях.

Важно, чтобы продукт был сухим, иначе возможен гидролиз с образованием дурнопахнущей масляной кислоты.

1.106. Бутилбутират

Бутиловый эфир масляной кислоты, n-Butyl-n-butyrate (Arc. 412), Butyl butyrate (RIFM, H.+R., BBA).

$C_8H_{16}O_2$; 144,22

C. A. 109-21-7

Содержится во многих фруктах и в некоторых сортах эвкалиптового ЭМ.

Запах — сильный, сладко-фруктовый, нота перезрелых бананов. Жидкость, т. кип. 165 °С/1013 гПа, 55 °С/17 гПа; γ_{20}25,8 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 9,5 г/кг (кролики), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,866–0,869	25/25	1,405–1,407	60
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,869–0,872	20/20	1,405–1,408	48
РФ, 1990	97 (омыл.)	0,868–0,874	20/4	~1,406	—

Получают этерификацией масляной кислоты бутанолом.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

Широко применяют в пищевых ароматических эссенциях.

1.107. н-Амилбутират

Пентилбутират, н-амиловый эфир масляной кислоты, Amyl butyrate (Arc. 136), Pentylbutyrat (Miltitz).

$C_9H_{18}O_2$; 158,24

C. A. 626-77-7

Содержится во многих фруктах и ягодах.

Запах — сильный, фруктовый, ноты банана, ананаса. Жидкость, т. кип. 185 °C/1013 гПа, γ_{20} 26,2 дин/см.

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 0,865–0,870; n_D^{20} 1,412–1,414; т. всп. 65 °C.

Получают этерификацией масляной кислоты пентанолом.

Используется главным образом в пищевых ароматических эссенциях и довольно редко — в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.108. Изоамилбутират

Изоамиловый эфир масляной кислоты, iso-Amyl butyrate (Arc. 137), Isoamyl butyrate (RIFM, H.+R.), "Amyl butyrate" (GIV, IFF, BBA), Isoamylbutyrat (BASF, Miltitz).

$C_9H_{18}O_2$; 158,24

C. A. 106-27-4

Содержится во многих фруктах, а также в лавандовом, эвкалиптовом и других ЭМ.

Запах — сильный, фруктовый, ноты абрикоса, банана, ананаса. Жидкость, т. кип. 178,5–179 °C/1013 гПа; γ_{20} 25,5 дин/см. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,861–0,864	25/25	1,409–1,413	65
IFF, 1992	99 (ГЖХ)	0,860–0,868	25/25	1,409–1,413	53
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	0,863–0,865	20/20	1,410–1,413	58
H.+R., 1988	98 (ГЖХ)	0,860–0,863	25/25	1,409–1,412	60
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,860–0,864	25/25	1,409–1,414	60
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,864–0,870	20/20	1,410–1,414	60

Получают этерификацией масляной кислоты изоамиловым спиртом, выделенным из сивушного масла — отхода производства этилового спирта брожением.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.109. Гексилбутират

Гексиловый эфир масляной кислоты, Hexyl butyrate (Arc. 1645, RIFM), Hexylbutyrat (Miltitz).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C. A. 2639-63-6

Содержится во многих фруктах, землянике, а также в лавандовом, лавандиновом и других ЭМ.

Запах — сильный, фруктовый с нотой зелени и цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 208 °C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 0,863–0,868; n_D^{20} 1,416–1,420; т. всп. 90 °C.

Получают этерификацией масляной кислоты гексанолом.

Используют чаще всего в пищевых ароматических эссенциях и лишь изредка — в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

1.110. *цис*-3-Гексенилбутират

(3Z)-Гексенилбутират, *cis*-3-Hexenyl butyrate (Arc. 1613, Bedouk.).

$C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C. A. 16491-36-4

Запах — сильный, фруктово-винный, свежей зелени, маслянистый. Жидкость, т. кип. 192 °C/1013 гПа; 103 °C/33 гПа; d_{25}^{25} 0,889; n_D^{20} 1,432.

Продукт вырабатывается фирмой Bedouk., по всей вероятности, на полупроизводственных установках методом этерификации масляной кислоты *цис*-3-гексенолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.111. Этилизобутират

Этиловый эфир изомасляной кислоты, Ethyl-iso-butyrate (Arc. 1179), Ethyl isobutyrate (RIFM, H.+R.)

$C_6H_{12}O_2$; 116,17

С. А. 97-62-1

Содержится в землянике, меде, пиве.

Запах — сильный, эфирный, фруктовый. Жидкость, т. кип. 110 °С/1013 гПа; γ_{20} 23,1 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 98% (ГЖХ) этилизобутирата и имеет d_{25}^{25} 0,865–0,868; n_D^{20} 1,386–1,389; т. всп. 31 °С.

Получают этерификацией изомасляной кислоты этиловым спиртом.

Используют в отдушках для мыла и некоторых товаров бытовой химии, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.112. Изобутилизобутират

Изобутиловый эфир изомасляной кислоты, iso-Butyl-iso-butyrate (Arc. 415), Isobutylisobutyrat (Miltitz).

$C_8H_{16}O_2$; 144,22

С. А. 97-85-8

Содержится в хмеле, бананах, винограде.

Запах — фруктовый, эфирный со слабым жирным оттенком. Жидкость, т. кип. 147°С/1013 гПа.

Продажный продукт Miltitz (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) изобутилизобутирата и имеет d_{20}^{20} 0,853 – 0,859; n_D^{20} 1,396 – 1,402; т. всп. 37°С.

Получают этерификацией изомасляной кислоты изобутиловым спиртом.

Используют в отдушках для мыла и некоторых товаров бытовой химии при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.113. Изоамилизобутират

Изоамиловый эфир изомасляной кислоты, iso-Amyl-iso-butyrate (Arc. 138), Isoamylisobutyrat (Miltitz)

$C_9H_{18}O_2$, 158,24

С.А. 2050-01-3

Содержится в бананах, дыне, плодах папайи.

Запах — фруктовый, эфирный, ноты ананаса, сливы. Жидкость, т. кип. 169°С/1013 гПа. Смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	0,860–0,869	20/20	1,408–1,414	62
РФ, 1990	97 (омыл.)	0,859–0,862	20/4	~1,410	—

Получают этерификацией изомасляной кислоты изоамиловым спиртом, который выделяют из сивушного масла — отхода производства этилового спирта брожением.

В парфюмерных композициях и отдушках используют довольно редко и в малых дозах. Основное применение — пищевые ароматические эссенции. Ограничений IFRA нет.

1.114. Гексилизобутират

Гексиловый эфир изомасляной кислоты, Hexyl-iso-butyrate (Arc. 1646), Hexyl isobutyrate (RIFM), Hexylisobutyrat (Miltitz).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

С.А. 2349-07-7

Содержится в лавандовом ЭМ, а также в яблоках, сливе, хмеле.

Запах — сильный, фруктов и зелени. Жидкость, т. кип. 199°C/1013 гПа, 55–56°C/5 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (ГЖХ) гексилизобутирата и имеет d_{20}^{20} 0,857 – 0,863; n_D^{20} 1,412 – 1,416; т. всп. 71°C.

Получают этерификацией изомасляной кислоты гексиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.115. Нонилизобутират

Нониловый эфир изомасляной кислоты, Nonyl-iso-butyrate (Arc. 2368). $C_{13}H_{26}O_2$; 214,35

Запах — фруктово-цветочный, ноты абрикоса, апельсина, розы. Жидкость, т. кип. 220°C/1013 гПа.

Продукт , вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 99% (омыл.) нонилизобутирата и имеет d_4^{20} 0,850 – 0,860; n_D^{20} 1,424 – 1,427.

Получают этерификацией изомасляной кислоты очищенным ниниловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

1.116. *цис*-3-Гексенилизобутират

(3Z)-Гексенилизобутират, *cis*-3-Hexenyl-isobutyrate (Arc. 1614), *cis*-3-Hexenyl isobutyrate (RIFM), Verdural B extra (IFF). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C.A. 41519-23-7

Найден в ЭМ кудрявой мяты.

Запах — сильный, фруктов и свежей зелени. Жидкость, т. кип. 182°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы изомеров гексенилизобутир, в том числе не более 10% *транс*-изомера. Этот продукт имеет d_4^{20} 0,879 – 0,889; n_D^{20} 1,425 – 1,431; т. всп. 67°C.

Получают этерификацией изомасляной кислоты *цис*-3-гексенолом.

Используют в микродозах в парфюмерных композициях и дорогих отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.117. Гексадиенилизобутират

2,4-Гексадиенилизобутират, Hexadienyl-isobutyrate (Arc. 1578), 2,4-Hexadienyl isobutyrate (RIFM), Hexadienyl iso butyrate (IFF). $C_{10}H_{16}O_2$; 168,24

C.A. 16491-24-0

Запах — сильный, зелени, фруктов, ноты гальбанума, яблока, груши. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,903 – 0,911; n_D^{20} 1,464 – 1,469; т. всп. 80°C.

Получают этерификацией изомасляной кислоты 2,4-гексадиенолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.118. Метилпентенилизобутират

4-Метил-4-пентен-2-илизобутират, Isopentyrate (Firm.) $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C.A. 80118-06-5

Запах — фруктовый с цветочной и травянистой нотами, оттенком ромашки. Жидкость.

Продажный продукт Firm. (1992) имеет d_{20}^{20} 0,867 – 0,874; n_D^{20} 1,419 – 1,423; т. всп. 53°C.

Может быть получен взаимодействием 4-метил-4-пентен-2-ола с изомасляным ангидридом.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

1.119. Этилизовалерат

Этиловый эфир изовалериановой кислоты, Ethyl isovalerate (Arc 1362, RIFM, IFF, BBA), Ethylisovalerianat (Miltitz).

$C_7H_{14}O_2$; 130,19

C.A. 108-64-5

Содержится во многих фруктах, чае, меде.

Запах — сильный фруктово-винный, при разбавлении — яблочный. Жидкость, т. кип. 131–134°C/1013 гПа; γ_{20} 23,8 дин/см. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,861–0,869	25/25	1,394–1,399	35
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,863–0,867	20/20	1,395–1,399	27
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,862–0,866	25/25	1,395–1,399	29,5
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,864–0,870	20/20	1,396–1,400	36

Получают этерификацией изовалериановой кислоты этиловым спиртом.

Используют в небольших дозах (до 2%) в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет. Важный компонент пищевых ароматических эссенций.

1.120. Изоамилизовалерат

Изоамиловый эфир изовалериановой кислоты, iso-Amyl-iso-valerate (Arc. 229), Isoamyl isovalerate (RIFM), "Amyl valerate" (IFF), Isoamylisovalerianat (Miltitz).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C.A.659-70-1

Содержится в бананах и некоторых ЭМ.

Запах — фруктовый, спелых яблок. Жидкость, т. кип. 190–191°C/1013 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,851–0,859	25/25	1,410–1,415	70
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,856–0,860	20/20	1,413–1,415	80
РФ, 1990	97 (омыл.)	0,857–0,860	20/4	~1,412	69

Получают этерификацией изовалериановой кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в небольших дозах (до 2%) в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет. Применяют также в пищевых ароматических эссенциях.

1.121. Гексилизовалерат

Гексиловый эфир изовалериановой кислоты, n-Hexyl-iso-valerate (Arc. 1685), Hexyl isovalerate (RIFM, BBA).

$C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C.A. 10032-13-0

Содержится в некоторых фруктах.

Запах — фруктовый, ноты недозрелых фруктов, табачных листьев. Жидкость, т. кип. 215°C/1013 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

BBA (1988) вырабатывает ~98%-ный продукт с n_D^{20} 1,418.

Получают этерификацией изовалериановой кислоты гексанолом.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Разрешен к применению в пищевых ароматических эссенциях.

1.122. Декадиенилизовалерат

(2E), (4Z)-Декадиенилизовалерат, 2E, 4Z-Decadienyl isovalerate (Hüls). $C_{15}H_{26}O_2$; 238,38

C.A. 56699-32-2

Входит в состав ЭМ кипариса. Имеет запах и вкус можжевеловых ягод. Жидкость.

Продажный продукт Hüls (1990) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,886; т. всп. ~151°С.

Рекомендуется для использования в пищевых ароматических эссенциях и парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

1.123. Этил-2-метилбутират

Этиловый эфир 2-метилмасляной кислоты, Ethyl-2-methylbutyrate (Arc. 1292, Miltitz). $C_7H_{14}O_2$; 130,19

C.A. 7452-79-1

Содержится во фруктах и в ягодах.

Запах — резкий эфирно-фруктовый, ноты яблок, зелени, рома. Жидкость, т. кип. 131-132°С/1013 гПа.

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (омыл.) названного сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 0,868 – 0,873; n_D^{20} 1,391 – 1,399; т. всп. 26°С.

Получают этерификацией 2-метилмасляной кислоты этиловым спиртом.

Используют в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.124. Гексил-2-метилбутират

Гексиловый эфир 2-метилмасляной кислоты, Hexyl-2-methylbutyrate (Arc. 1674, RIFM, Miltitz), Cydrane (Roure). $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C.A. 10032-15-2

Содержится в яблоках, землянике.

Запах — фруктовый с цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 62°С/2,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure, 1992	99	0,860–0,864	1,416–1,420	91
Miltitz, 1992	98 (ГЖХ)	0,858–0,868	1,416–1,422	83

Получают этерификацией 2-метилмасляной кислоты гексанолом.

Используют в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 4%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.125. Изопентенилпивалат

3-Метил-3-бутенилпивалат, 3-метил-3-бутениловый эфир 2,2-диметилпропионовой кислоты, Romilat (Henkel). $C_{10}H_{18}O$; 170,25

Запах — свежий, травянистый с фруктово-цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 64°С/18 гПа.

Продажный продукт Henkel (1988) содержит ~95% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{25}^{25} ~ 0,868, n_D^{20} 1,420 – 1,424, т. всп. 58°С.

Может быть получен этерификацией пивалиновой кислоты изобутенилкарбинолом — отходом производства изопрена из изобутилена и формальдегида.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.126. Этилкапронат

Этиловый эфир капроновой кислоты, этилгексаноат. Ethyl caproate (Arc. 1183, RIFM, IFF, BBA, H.+R.), Ethylcapronat (BASF, Miltitz). $C_8H_{16}O_2$; 144,22

C.A. 123-66-0

Содержится в ананасе, землянике и других фруктах и ягодах.

Запах — сильный, фруктово-винный, нюансы яблока, ананаса, банана. Жидкость, т. кип. 166°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,866–0,874	25/25	1,405–1,409	53
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,869–0,872	20/20	1,406–1,409	54
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,867–0,872	25/25	1,407–1,409	60
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,867–0,871	25/25	1,406–1,409	46
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,870–0,874	20/20	1,406–1,409	52

Получают этерификацией капроновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 3%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.127. Изобутилкапронат

Изобутиловый эфир капроновой кислоты, iso-Butyl caproate (Arc. 420), Isobutyl caproate (RIFM, GIV).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C.A. 105-79-3

Содержится в бананах, грейпфруте.

Запах — фруктово-винный с нотой ананаса. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 98% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 0,854 – 0,858; n_D^{20} 1,412 – 1,416; т. всп. 76°С.

Получают этерификацией капроновой кислоты изобутанолом.

Используют в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

1.128. Изоамилкапронат

Изоамиловый эфир капроновой кислоты, iso-Amyl caproate (Arc. 143), Isoamyl caproate (RIFM), Isoamylcapronat (Miltitz).

$C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C.A. 2198-61-0

Содержится в яблоках, землянике, апельсиновом ЭМ.

Запах — фруктовый. Жидкость, т. кип. 224–227°С/1013 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) смеси изомеров изоамилкапроната и имеет d_{20}^{20} 0,860–0,866; n_D^{20} 1,418–1,422; т. всп. 90°С.

Получают этерификацией капроновой кислоты изоамиловым спиртом, выделяемым из сивушного масла — отхода производства этилового спирта брожением.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.129. Гексилкапронат

Гексиловый эфир капроновой кислоты, гексилгексаноат, Hexyl caproate (Arc. 1650, RIFM), Hexylcapronat (Miltitz).

$C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

C.A. 6378-15-0

Содержится в яблоках, грейпфруте, ананасе.

Запах — фруктовый, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 245°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Miltitz, 1992	98 (ГЖХ)	0,860–0,866	1,424–1,427	108
РФ, 1990	99 (омыл.)	~0,865	1,425–1,426	—

Получают этерификацией капроновой кислоты гексанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 8%. Ограничений IFRA нет.

1.130. Аллилкапронат

Аллиловый эфир капроновой кислоты, аллилгексаноат, Allyl caproate (Arc. 70, RIFM, GIV, IFF, H.+R., BBA), Allylcapronat (BASF) $C_9H_{16}O_2$; 156,23

C.A. 123-68-2

Запах — сильный фруктовый (ананаса) с жирной нотой и оттенком рома. Жидкость, т. кип. 186–188°C/1013 гПа, 75–76°C/20 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >0,22 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >0,3 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,885–0,890	25/25	1,422–1,426	68
IFF, 1992	98 (ГЖХ)	0,884–0,892	20/4	1,422–1,426	65
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,884–0,890	25/25	1,422–1,426	74
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,887–0,891	20/20	1,423–1,426	66
BASF, 1988	98 (ГЖХ)	0,884–0,890	25/25	1,422–1,426	66

Получают этерификацией капроновой кислоты аллиловым спиртом (Голендеев В. П., Журн. общ. хим., 1940, 10, № 15, с. 1408).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. IFRA запрещает использование продукта, если в нем содержится более 0,1% аллилового спирта.

Применяется во многих пищевых ароматических эссенциях.

1.131. Этил-2-метилвалерат

Этиловый эфир 2-метилвалериановой кислоты, этил-2-метилпентаноат, Ethyl 2-methylvalerate, Manzanoate (Quest). $C_8H_{16}O_2$; 144,22

C.A. 39255-32-8

Запах — свежий, фруктов и зелени Жидкость, т. кип. 153°C/1013 гПа

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 99% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 0,864 – 0,870; n_D^{20} 1,402 – 1,406; т. всп. 46°C.

Получают этерификацией 2-метилвалериановой кислоты этиловым спиртом.

Используют главным образом в отдушках для шампуней, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

1.132. Бутил-2-метилвалерат

Бутиловой эфир 2-метилвалериановой кислоты, бутил-2-метилпентаноат, Methylcamomille (Roure). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

Запах — сильный цветочно-фруктовый, ноты розы, ромашки. Жидкость.

Продажный продукт Roure (1989) имеет d_{20}^{20} ~ 0,858, n_D^{20} ~ 1,412; т. всп. 77°C.

Получают этерификацией 2-метилвалериановой кислоты бутанолом.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.133. 2-Метиламил-2-метилвалерат

2-Метилпентил-2-метилпентаноат, Peranat (Henkel). $C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

Запах — фруктово-цветочный, ноты яблока, груши, оттенок розы. Жидкость, т. кип. 103°C/21 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel (1988), — oral LD_{50} 3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel (1988) содержит ~95% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{25}^{25} ~ 0,857; n_D^{20} 1,420 – 1,424; т. всп. 95°C.

Может быть получен из 2-метилпентаналя по реакции Тищенко (Schaper U.-A., Bruns K., заявка ФРГ 3225293, 7.07.82–12.01.84, РЖХ, 1985, 3Р495П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

1.134. Этилгептаноат

Этиловый эфир энантовой кислоты, Ethyl heptoate (Arc. 1255), Ethyl heptanoate (H.+R., BBA).

$C_9H_{18}O_2$, 158,24

C.A. 106-30-9

Содержится в некоторых фруктах, коньяке.

Запах — сильный, фруктово-винный. Жидкость, т. кип. 186°C/1013 гПа; γ_{20} 26,5 дин/см.

Острая токсичность, по данным Merck (1992), — oral LD_{50} 34,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	98 (омыл)	0,865–0,869	25/25	1,411–1,415	80
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,865–0,869	20/20	1,411–1,415	70

Получают этерификацией энантовой кислоты этиловым спиртом

В парфюмерных композициях и отдушках использують довольно редко. Широко применяют в пищевых ароматических эссенциях.

1.135. Аллилгептаноат

Аллиловый эфир энантовой кислоты, Allyl heptoate (Arc. 85, H.+R.), Allyl heptylate (RIFM), Allyl heptanoate (Quest).

$C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C A. 142-19-8

Запах — сильный, фруктовый, ноты ананаса, бананов, яблок Жидкость, т кип 210°C/1013 гПа, 75°C/6,7 гПа

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 0,5 г/кг (крысы), derm LD_{50} 0,81 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ) %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп , °C
H.+R., 1988	98	0,880–0,884	25/25	1,427–1,429	99
Quest, 1989	98	0,884–0,887	20/20	1,427–1,430	75

Получают этерификацией энантовой кислоты аллиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 15%. IFRA запрещает использование продукта, если в нем содержится более 0,1% аллилового спирта. Применяется в пищевых ароматических эссенциях.

1.136. Этилкаприлат

Этилоктаноат, этиловый эфир каприловой кислоты, Ethyl caprylate (Arc. 1185, RIFM, H.+R., BBA).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C.A. 106-32-1

Содержится в некоторых фруктах, коньяке.

Запах — фруктовый, ноты яблока, ананаса, коньяка. Жидкость, т. кип. 207°C/1013 гПа, γ_{20} 27,2 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 26 г/кг (крысы), derm LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H +R., 1988	98 (омыл.)	0,864–0,867	25/25	1,417–1,419	86
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,866–0,870	20/20	1,417–1,420	79

Получают этерификацией каприловой кислоты этиловым спиртом

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет. Применяют во многих пищевых ароматических эссенциях.

1.137. Этил-2-этилкапронат

Этил-2-этилгексаноат, этиловый эфир 2-этилгексановой кислоты, Ethyl 2-ethylhexanoate, Irotyl (Henkel).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C.A. 2983-37-1

Запах — свежий, нота ириса с фруктово-травянистым оттенком. Жидкость, т. кип. 81°С/24 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel (1988), — oral LD_{50} >3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel (1988) содержит ~95% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{25}^{25} ~ 0,860; n_D^{20} 1,412 – 1,416; т. всп. 67°С.

Получают этерификацией 2-этилгексановой кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

1.138. Этил-3,5,5-триметилкапронат

Этил-3,5,5-триметилгексаноат, этиловый эфир 3,5,5-триметилкапроновой кислоты, Ethyl 3,5,5-trimethylhexanoate, Melusat (Henkel).

$C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

С. А. 67707-75-9

Запах — фруктово-цветочный с оттенком яблок. Жидкость, т. кип. 83–85°С/16 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным Henkel (1988), — oral LD_{50} 5,2 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel (1988) содержит ~95% (ГЖХ) суммы изомеров названного сложного эфира и имеет d_{25}^{25} ~0,860; n_D^{20} 1,418 1,422; т. всп. 76°С.

Получают этерификацией 3,5,5-триметилкапроновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

1.139. Этилдеканоат

Этилкапринат, этиловый эфир каприновой кислоты, Ethyl decanoate, Ethyl decylate (Arc. 1208), Ethyl caprate (RIFM, BBA), Ethyl caprinate (H. + R.).

$C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

С. А. 110-38-3

Запах — фруктово-винный, ноты груши, коньяка, воска. Жидкость, т. кип. 241,5°С/1013 гПа, 118–121°С/20 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H. + R., 1988	98 (омыл.)	0,862–0,868	25/25	1,425–1,427	123
BBA, 1990	98 (ГЖХ),	0,862–0,866	20/20	1,425–1,428	> 100

Получают этерификацией каприновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет. Применяют в пищевых ароматических эссенциях.

1.140. Этиллаурат

Этиллауринат, этилдодеканоат, Ethyl laurate (Arc. 1277, RIFM, GIV, BBA), Oenantic ether (IFF).

$C_{14}H_{28}O_2$; 228,37

С. А. 106-33-2

Запах — мягкий, слегка жирный, фруктово-цветочный. Жидкость, т. кип. 275°C/1013 гПа; γ_{20} 28,4 дин/см. Смесь этиловых эфиров кислот C_{10}–C_{14}.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,858–0,862	25/25	1,430–1,434	100
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,861–0,864	20/20	1,431–1,434	110
IFF, 1992	80 (ГЖХ)	0,859–0,865	20/4	1,428–1,432	100
РФ, 1990	98,5 (омыл.)	0,863–0,870	20/4	1,433–1,435	118

Примечание. Продукт IFF содержит этиллаурат и этилдеканоат в соотношении ~ 3:1.

Традиционный способ производства состоит в переэтерификации кокосового масла этиловым спиртом и в последующей фракционированной вакуум-дистилляции.

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

1.141. Этилмиристат

Этилтетрадеканоат, этиловый эфир миристиновой кислоты, Ethyl myristate (Arc. 1310, RIFM, GIV). $C_{16}H_{32}O_2$; 256,44

C. A. 124-06-1

Найден в ирисовом ЭМ.

Запах — мягкий, жирный с нотой ирисового масла. Жидкость, т. кип. 309°C/1013 гПа; т. пл. 12°C; γ_{20} 29,9 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продукт должен содержать не менее 98% (омыл.) сложного эфира и иметь d_{25}^{25} 0,856–0,860; n_D^{20} 1,434–1,438; т. всп. >100°C. Может быть получен этерификацией

миристиновой кислоты этиловым спиртом или выделен фракционированной вакуум-дистилляцией из смеси этиловых эфиров, получаемых переэтерификацией кокосового масла.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.142. Изопропилмиристат

Изопропилтетрадеканоат, изопропиловый эфир миристиновой кислоты, iso-Propyl myristat (Arc. 2726), Isopropyl myristat (RIFM, BBA), Deltyl (GIV). $C_{17}H_{34}O_2$; 270,46

C. A. 110-27-0

Практически без запаха. Жидкость. Смесь изопропиловых эфиров кислот C_{12}, C_{14}, C_{16}.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >100 мл/кг (мыши), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Эфирное число, мг KOH/г	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	202–211	0,847–0,854	25/25	1,433–1,436	>100
BBA, 1990	205–210	0,851–0,854	20/20	1,434–1,436	152

Получают этерификацией смеси кислот с преимущественным содержанием миристиновой кислоты действием изопропилового спирта.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в качестве растворителя, разбавителя и фиксатора запаха. Ограничений IFRA нет.

1.143. Гептилметакрилат

Гептиловый эфир метакриловой кислоты, Cryptogeryl (Roure). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

Запах — свежий, фруктово-цветочный, ноты лаванды, розы. Жидкость.

Продажный продукт Roure (1985) имеет d_{20}^{20} ~0,882; n_D^{20} ~1,434; т. всп. 96°С.

Может быть получен переэтерификацией метилметакрилата гептанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.144. Метиловый эфир тиглиновой кислоты

Метилтиглат, метил-2-метил-(E)-2-бутеноат, метил-*транс*-2-метилкротонат, Methyl tiglate (RIFM), Methyltiglat (Wacker).

$C_6H_{10}O_2$; 114,15

С. А. 6622-76-0

Запах — эфирный, подобный запаху рома. Жидкость, т. кип. 136°С/986 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Wacker (1990) содержит ~ 98% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{20}^{20} ~ 0,949; n_D^{20} ~ 1,437; т. всп. 40°С.

Получают этерификацией тиглиновой кислоты метанолом.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

1.145. Этиловый эфир тиглиновой кислоты

Этилтиглат, этил-2-метил-(E)-2-бутеноат, этил-*транс*-2-метилкротонат, Ethyl tiglate (Arc. 1356, RIFM), Ethyltiglat (Wacker).

$C_7H_{12}O_2$; 128,18

С. А. 5837-78-5

Содержится в ЭМ гардении.

Запах — сильный, эфирный, фруктовый с нотой карамели. Жидкость, т. кип. 141,5°С/1013 гПа, 56°С/20 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Wacker (1990) содержит ~98% этилтиглата и имеет d_{20}^{20} ~ 0,924; n_D^{20} ~1,435; т. всп. 43°С.

Получают этерификацией тиглиновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в пищевых ароматических эссенциях и парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

1.146. Изобутиловый эфир тиглиновой кислоты

Изобутилтиглат, изобутил-2-метил-(E)-2-бутеноат, изобутил-*транс*-2-метилкротонат, Isobutyltiglat (Wacker).

$C_9H_{16}O_2$; 156,23

С. А. 61692-84-0

Содержится в ЭМ ромашки.

Запах — травянисто-фруктовый со слабым эфирным оттенком. Жидкость, т. кип. 74-75°С/16 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% изобутилтиглата и имеет d_{20}^{20} ~ 0,899; n_D^{20}1,435-1,440; т. всп. 58°С.

Может быть получен этерификацией тиглиновой кислоты изобутанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.147. Изоамиловый эфир тиглиновой кислоты

Изоамилтиглат, изоамил-2-метил-(E)-2-бутеноат, изоамил-*транс*-2-метилкротонат, iso-Amyl tiglate (Arc. 225), Isoamyltiglat (Wacker)

$C_{10}H_{18}O_2$ 170,25

С. А. 41519-18-0

Содержится в ЭМ ромашки.

Запах — сладкий, винно-травянистый. Жидкость, т. кип. 91°С/16 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~97% (ГЖХ) изоамилтиглата и имеет d_{20}^{20} ~ 0,897; n_D^{20} 1,438-1,443; т. всп. 62°С.

Может быть получен этерификацией тиглиновой кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.148. Гексиловый эфир тиглиновой кислоты

Гексилтиглат, гексил-2-метил-(E)-2-бутеноат, гексил-*транс*-2-метилкротонат, Hexyl tiglate (Arc. 1682, RIFM), Hexyltiglat (Wacker). $C_{11}H_{20}O_2$; 184, 28

C. A. 16930-96-4

Содержится в ЭМ лавандина, некоторых сортов лаванды, гардении и др. Жидкость, т. кип. 108°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% (ГЖХ) гексилтиглата и имеет $d_{20}^{20} \sim 0,894; n_D^{20}$ 1,442–1,445; т. всп. 95°C.

Получают этерификацией тиглиновой кислоты гексиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.149. Изобутиловый эфир ангеликовой кислоты

Изобутилангелат, изобутил-2-метил-(Z)-2-бутеноат, изобутил-*цис*-2-метилкротонат, iso-Butyl angelate (Arc. 396), Isobutylangelat (Wacker). $C_9H_{16}O_2$; 156, 23

C. A. 7779-81-9

Содержится в ЭМ ромашки.

Запах — травянистый с винно-фруктовым оттенком. Жидкость, т. кип. 177–177,5°C/1013 гПа; 75°C/16 гПа. Содержит примесь (E)-изомера — изобутилтиглата.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% (омыл.) сложных эфиров и минимум 70% изобутилангелата. Он имеет $d_{20}^{20} \sim 0,893; n_D^{20}$ 1,430–1,440; т. всп. 56°C.

Получают этерификацией ангеликовой кислоты изобутанолом

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.150. Изоамиловый эфир ангеликовой кислоты

Изоамилангелат, изоамил-2-метил-(Z)-бутеноат, изоамил-*цис*-2-метилкротонат, iso-Amyl angelate (Arc. 129), Isoamylangelat (Wacker). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C. A. 10482-55-0

Содержится в ЭМ ромашки.

Запах — травянистый с эфирной нотой. Жидкость, т. кип. 86°C/16 гПа. Обычно имеет примесь (E)-изомера — изоамилтиглата.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% (омыл.) сложных эфиров и минимум 70% изоамилангелата. Он имеет $d_{20}^{20} \sim 0,893; n_D^{20}$ 1,435–1,445; т. всп. 56°C.

Может быть получен этерификацией ангеликовой кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.151. Метил-2-гексеноат

Метиловый эфир 2-гексеновой кислоты, Methyl-2-hexenoate (Arc. 2053), Carbavert (Henkel). $C_7H_{12}O_2$; 128,18

C. A. 32585-08-3

Запах – фруктовый, зелени, нота банана. Жидкость, т. кип. 169°C/1013 гПа. 53°C/20 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel (1989), — oral $LD_{50} >$ 3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel содержит ~95% (ГЖХ) метилгексеноата и имеет $d_{25}^{25} \sim 0,915; n_D^{20}$ 1,432–1,436; т. всп. 50°C.

Получают этерификацией 2-гексеновой кислоты метанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях.

1.152. Этил-2-октеноат

Этиловый эфир 2-октеновой кислоты, Ethyl 2-octenoate, Poiralyl E (Roure). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C. A. 7367-82-0

Запах сильный, фруктов и зелени, ноты ананаса, груши. Жидкость.

Продажный продукт Roure (1985) имеет $d_{20}^{20} \sim 0,888; n_D^{20} \sim 1,441$; т. всп. 98°C.

Может быть получен этерификацией 2-октеновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.153. Неофолион

Метил-2-ноненоат, метиловый эфир 2-ноненовой кислоты, Methyl nonylenate (Arc. 2139, RIFM), Neofolione (GIV), Beauvertate (Quest). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

С. А. 111-79-5

Запах — резкий, свежей зелени, листьев фиалки, с цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 90°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98 (омыл.)	0,895–0,899	25/25	1,443–1,446	91
Quest, 1989	95 (ГЖХ)	0,894–0,900	20/20	1,440–1,445	82
РФ, 1990	99 (омыл.)	~0,896	20/4	1,439–1,445	—

Обычно получают взаимодействием энантового альдегида с малоновой кислотой и последующей этерификацией образующейся непредельной кислоты.

CHO $\xrightarrow{CH_2(COOH)_2}$ COOH $\xrightarrow{CH_3OH}$ COOCH$_3$

Процесс конденсации возможно проводить с использованием в качестве катализатора микроколичеств ацетата пиперидина (Ragoussis N., Tetrahedron Lett. 1987, 28, № 1, 93, РЖХ 1987, 13Ж133).

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.154. Метилпентеновая кислота

2-Метил-2-пентеновая кислота, Strawberiff (IFF). $C_6H_{10}O_2$; 114,15

С. А. 3142-72-1

Запах — сильный, земляники. Жидкость, склонная к кристаллизации.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — derm. LD_{50} 5 г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) названной кислоты и имеет d_4^{20}0,979 – 0,987; n_D^{20}1,457 – 1,462; т. всп. >100°C.

Может быть получен окислением соответствующего альдегида — продукта кротоновой конденсации пропионового альдегида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках (обычно при дозировке 0,1–0,5%), а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет. Этиловый эфир 2-метил-2-пентеновой кислоты (Arc. 1304) имеет фруктовый запах с нотами банана, ананаса, земляники и также может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках.

1.155. Метил-(2E, 4Z)-декадиеноат

Метиловый эфир (2E, 4Z)-декадиеновой кислоты, 2,4-Decadienoic acid methyl ester (Hüls), Methyl decadienoate. $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

С. А. 4493-42-9

Содержится в некоторых сортах груши.

Запах — сильный, фруктовый (груши). Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт Hüls (1990) содержит не менее 99% (ГЖХ) суммы изомеров названного сложного эфира, в том числе минимум 85% (ГЖХ) 2E,4Z-изомера. Продукт имеет d_4^{20} 0,917; т. всп. ~113°C

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях.

1.156. Этил-(2E, 4Z)-декадиеноат

Этилдекадиеноат, этиловый эфир (2E,4Z)-декадиеновой кислоты, Ethyl *trans*-2, *cis*-4-decadienoate (RIFM), 2,4-Decadienoic acid ethyl ester (Hüls), Pear ester. $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 3025-30-7

Содержится в некоторых сортах груши.

Запах — сильный, фруктовый (груши). Жидкость, т. кип. 70–72°C/6 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики)

Продажный продукт Hüls (1990) содержит не менее 99% (ГЖХ) суммы изомеров названного сложного эфира, в том числе минимум 85% (ГЖХ) 2E,4Z-изомера, и имеет d_4^{20} 0,904; т. всп. ~121°C.

Используется в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.157. Пропил-(2E, 4Z)-декадиеноат

Пропилдекадиеноат, пропиловый эфир (2E, 4Z)-декадиеновой кислоты, Propyl decadienoate, 2,4-Decadienoic acid n-propyl ester (Hüls). $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

С. А. 28316-62-3

Запах — сильный, напоминает запах груши. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт Hüls (1990) содержит не менее 99% (ГЖХ) суммы изомеров сложных эфиров, в том числе минимум 85% (ГЖХ) (2E,4Z)-изомера, и имеет d_4^{20} 0,898; т. всп. ~132°C.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.158. Метилундециленат

Метил-10-ундеценоат, метиловый эфир ундеценовой кислоты, Methyl undecylenate (RIFM, IFF). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 111-81-9; 5760-50-9

Запах — жирный, ноты розы, зелени, коньяка. Жидкость, т. кип 248–249°C/1013 гПа, 112°C/11 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) метилундецилената и имеет d_4^{20} 0,882–0,890; n_D^{20} 1,437–1,441; т. всп. 90°C.

Получают этерификацией ундециленовой кислоты метанолом.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет. Разрешен к применению в пищевых ароматических эссенциях.

1.159. Метилгептинкарбонат

Метиловый эфир гептинкарбоновой кислоты, метил-2-октиноат, Methyl heptin carbonate (Arc. 2045, RIFM), Folione (GIV). $C_9H_{14}O_2$; 154,21

С. А. 111-12-6

Запах — очень сильный, проникающий, при разбавлении — листьев фиалки, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 217°C/1013 гПа, 94°C/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 2,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,3 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 98% (ГЖХ) метилгептинкарбоната и имеет d_4^{20} 0,922–0,926; n_D^{20} 1,446-1,449; т. всп. 95°C.

Может быть получен карбоксилированием 1-гептина и последующей этерификацией образующейся гептинкарбоновой кислоты.

Используется в небольших дозах в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и косметики. Предельная доза, установленная IFRA, составляет 0,05% от массы композиции или отдушки. Может применяться в пищевых ароматических эссенциях.

1.160. Метилоктинкарбонат

Метиловый эфир октинкарбоновой кислоты, метил-2-нониноат, Methyl octin carbonate (Arc. 2144, RIFM, GIV). $C_{10}H_{16}O_2$; 168,24

С. А. 111-80-8

Запах — сильный, зелени, листьев фиалки. Жидкость, т. кип. 122°C/27 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,2 г/кг (крысы), derm LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 98% (ГЖХ) метилоктинкарбоната и имеет $d_4^{20} 0,914 - 0,918; n_D^{20}$ 1,447–1,450; т. всп. >100°C.

Может быть получен карбоксилированием 1-октина и последующей этерификацией образующейся октинкарбоновой кислоты.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и косметики. Предельная доза, установленная IFRA, составляет 0,05% от массы композиции или отдушки. Разрешен для использования в пищевых ароматических эссенциях.

1.161. Этиллактат

Этиловый эфир молочной кислоты, этиловый эфир 2-гидроксипропионовой кислоты Ethyl lactate (Arc. 1276, RIFM). $C_5H_{10}O_3$; 118,14

С. А. 97-64-3

Содержится во многих фруктах и винах.

Запах — мягкий, эфирно-маслянистый. Жидкость, т. кип. 154°C/1013 гПа; $d_4^{20} \sim 1,035; n_D^{20} \sim 1,413; \gamma_{20}$ 29,2 дин/см; σ_{20} 2,7 спуаз; т. всп 55°C, смешивается с водой.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Получают этерификацией молочной кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках в качестве растворителя, особенно при создании изделий с уменьшенным содержанием спирта Ограничений IFRA нет. Применяют также при создании пищевых ароматических эссенций.

1.162. Этилгидроксибутират

Этил-3-гидроксибутират, этиловый эфир 3-гидроксимасляной кислоты, Ethoxiff (IFF). $C_6H_{12}O_3$; 132,17

C. A. 5405-41-4

Запах — сладкий, фруктовый с нотой грейпфрута. Жидкость, т. кип. 170°C/1013 гПа.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет $d_4^{20} \sim 1,013; n_D^{20} 1,416 - 1,424$; т. всп. 78°C.

Получают этерификацией 3-гидроксимасляной кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

1.163. *цис*-3-Гексенилметилкарбонат

(3Z)-Гексенилметилкарбонат, *цис*-3-гексенилметиловый эфир угольной кислоты, Liffarome (IFF). $C_8H_{14}O_3$; 158,20

С. А. 67333-96-9

Запах — сильный, натуральный, листьев фиалки, свежей зелени. Жидкость.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral $LD_{50} > 5$ г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет $d_4^{20} 0,965 - 0,973; n_D^{20} 1,423 - 1,429$; т. всп. 77°C.

Может быть получен переэтерификацией диметилкарбоната *цис*-3-гексенолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2% Эффективно введение в композиции и отдушки даже микроколичеств Ограничений IFRA нет.

1.164. Аллилизоамилгликолят

Аллиловый эфир изоамилоксиуксусной кислоты, аллиловый эфир 6-метил-3-оксагептановой кислоты, Allyl amyl glycolate (IFF), Isogalbanate (Dragoco). $C_{10}H_{18}O_3$; 186,25

C. A. 67634-00-8

Запах — резкий, проникающий, ноты гальбанума, фруктов. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral LD_{50} 0,73 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ, 2 изомера), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97	0,936–0,944	1,428–1,433	>100
Dragoco	95	0,934–0,940	1,427–1,433	83

Может быть получен этерификацией изоамилоксиуксусной кислоты аллиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 1%. IFRA запрещает использование продукта, если в нем содержится более 0,1% аллилового спирта.

1.165. Ацетоуксусный эфир

Этилацетоацетат, этиловый эфир ацетоуксусной кислоты, Ethyl acetoacetate (Arc. 1138, RIFM). $C_6H_{10}O_3$, 130,15

C. A. 141-97-9

Запах — эфирно-фруктовый, ноты рома, яблок Жидкость, т кип 181°С/1013 гПа, 100°С/106 гПа, 74°С/19 гПа, d_4^{20} 1,028, n_D^{20} 1,420, т всп 85°С

Острая токсичность по RIFM (1974). oral LD_{50} 3,98 г/кг (крысы), derm LD_{50} > 5 г/кг (кролики)

Ацетоуксусный эфир, пригодный для парфюмерных целей, получают вакуум-ректификацией технического продукта, вырабатываемого химической промышленностью.

Используют в отдушках товаров бытовой химии и пищевых ароматических эссенциях Ограничений IFRA нет.

1.166. Гексилацетоуксусный эфир

Этил-2-гексилацетоацетат, этил-2-ацетилоктаноат, Ethyl-2-hexyl acetoacetate (Arc. 1264), Gelsone (IFF), Jessate (Naarden-Quest), Hexyljasmat (BASF), Jaswamin (Wacker). $C_{12}H_{22}O_3$; 214, 31

C. A. 29214-60-6

Запах — сильный, цветочно-фруктовый с нотой жасмина. Жидкость, т. кип 115°С/6,7 гПа, 80°С/1 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 12,3 мл/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	97	0,931–0,939	20/4	1,432–1,436	>100
Quest, 1989	95	0,934–0,938	20/20	1,433–1,436	95
BASF, 1987	98	0,925–0,929	25/25	1,431–1,434	134

Обычно получают действием гексилгалогенида на ацетоуксусный эфир в присутствии алкоголята щелочного металла. Возможен синтез из 1-гексена и ацетоуксусного эфира радикальным присоединением (Подберезина А С и др , Пищевая пром-сть, 1991, № 7, с. 71, РЖХ, 1991, 24Р2060).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10% Ограничений IFRA нет

1.167. Диэтилмалонат

Диэтиловый эфир малоновой кислоты, малоновый эфир Diethyl malonate (Arc. 910, RIFM) $C_7H_{12}O_4$; 160,18

C. A. 105-53-3

Запах — мягкий, фруктовый с нотой яблока. Жидкость, т. кип. 199°C/1013 гПа, 89°C/17 гПа; d_4^{20} ~1,055; n_D^{20} 1,414–1,416; γ_{20} 31,9 дин/см; т. всп. 73°C.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 14,9 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит не менее 97% (омыл.) названного сложного эфира и максимум 0,1% малоновой кислоты.

Получают этерификацией малоновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в отдушках различного назначения, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.168. Диэтилсебацинат

Диэтиловый эфир себациновой кислоты, Diethyl sebacate (Arc. 914, RIFM). $C_{14}H_{26}O_4$; 258,36

C. A. 110-40-7

Запах — слабый, фруктовый с нотой дыни. Жидкость, т. кип. 307–308°C/1013 гПа, 184°C/24 гПа, 156°C/8 гПа; d_4^{20}0,963–0,964; n_D^{20}1,436–1,437; γ_{20} 33 дин/см; т. всп. 71°C.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 14,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит не менее 97% (омыл.) диэтилсебацината и максимум 0,02% себациновой кислоты.

Получают этерификацией себациновой кислоты этиловым спиртом.

Используют в некоторых парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

1.169. Триэтилцитрат

Триэтиловый эфир лимонной кислоты, Triethyl citrate (Arc. 2990, RIFM) $C_{12}H_{20}O_7$; 276,29

C. A. 77-93-0

Запах — очень слабый, фруктовый с нотой сливы. Жидкость, т. кип. 294°C/1013 гПа, 212°C/40 гПа, 127°C/1 гПа; d_4^{20} ~1,140; n_D^{20} 1,446–1,448.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 7,0 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит не менее 95% (омыл.) триэтилцитрата и максимум 3% лимонной кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в качестве модификатора запаха и разбавителя. Ограничений IFRA нет. Применяется в пищевых ароматических эссенциях.

1.170–1.178. N- И S-СОДЕРЖАЩИЕ СОЕДИНЕНИЯ

1.170. 2-Метилдеканонитрил

Frutonile (Quest) $C_{11}H_{21}N$; 177,30

C. A. 69300-15-8

Запах — легкий, цветочный, жасмина с оттенком персика, стойкий. Жидкость, т. кип. 245°C/1013 гПа.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного нитрила и имеет d_{20}^{20} ~0,814; n_D^{20} >1,429; т. всп. >68°C.

Может быть получен из метилоктилацетальдегида путем его превращения в оксим и последующей дегидратации:

CHO → N OH → CN

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.171. Додеканонитрил

Лауринонитрил, Dodecyl nitrile (Arc. 1121), Clonal (IFF). $C_{12}H_{23}N$; 181,32

C. A. 2437-25-4

Запах — цитрусовый (апельсина, грейпфрута) с жирно-альдегидной нотой. Жидкость, т. кип. 252°С/1013 гПа.

Острая токсичность, по данным Merck (1992), — oral LD_{50} 0,5 г/кг (крысы).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного нитрила и имеет d_4^{20} 0,820–0,828; n_D^{20} 1,433–1,438; т. всп. >100°С.

Один из способов промышленного получения состоит в превращении додеканаля в оксим и в последующей дегидратации, например, уксусным ангидридом.

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

1.172. 3-Метилдодеканонитрил

Frescile (Quest). $C_{13}H_{25}N$; 195,35

С. А. 85351-07-1

Запах — сильный, апельсина, нота свежести, морского бриза. Жидкость, т. кип. 282°С.

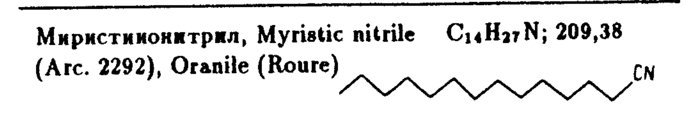
Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 99% (ГЖХ) названного нитрила и имеет d_{20}^{20} ~0,825; n_D^{20} ~1,439; т. всп. >100°С.

Может быть получен из 3-метилдодеканаля путем оксимирования и последующей дегидратации образующегося оксима.

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

1.173. Тетрадеканонитрил

Миристинонитрил, Myristic nitrile $C_{14}H_{27}N$; 209,38
(Arc. 2292), Oranile (Roure)



Запах — сильный, свежий, апельсина, зелени. Жидкость, т. кип. 286°С; т. пл. 19°С.

Продажный продукт Roure (1985) имеет d_{20}^{20} ~0,824; n_D^{20} ~1,440; т. всп. 157°С.

Может быть получен оксимированием тетрадецилового альдегида и последующей дегидратацией оксима.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

1.174. Ундециленонитрил

10-Ундеценонитрил, Undecylennitrile (Dragoco). $C_{11}H_{19}N$; 165,28

Запах — сильный, цитрусовый со свежей нотой морского бриза. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт Dragoco (1989) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров ундециленонитрила и имеет d_4^{20} 0,830–0,840; n_D^{20} 1,445–1,453; т. всп. >110°С.

Может быть получен из ундециленового альдегида оксимированием и последующей дегидратацией образующегося оксима.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

1.175. Тридеценонитрил

2-Тридеценонитрил, Tridecene-2-nitrile $C_{13}H_{23}N$; 193,33
(Quest, Dragoco), Ozonil (H.+R.).

С. А. 22629-49-8

Запах — сильный, цитрусовый (лайма). Жидкость, т. кип. 110–118°С/1,3 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 5 мл/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ, сумма изомеров), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98	0,832–0,838	25/25	1,451–1,454	134
Quest, 1989	98	0,836–0,840	20/20	1,450–1,454	139
Dragoco, 1989	95	0,834–0,840	20/20	1,450–1,455	>110

Может быть получен конденсацией ундецилового альдегида с циануксусной кислотой и последующим декарбоксилированием продукта конденсации.

Используют главным образом в отдушках для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

1.176. Оксим 5-метилгептан-3-она

Stemone (GIV) — $C_8H_{17}ON$; 143,24

C. A. 22457-23-4

Запах — сильный, зелени, листьев. Жидкость.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного оксима и имеет d_4^{20} 0,886–0,891; n_D^{20} 1,450–1,455; т. всп. 95°C.

Получают оксимированием соответствующего кетона.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

1.177. Диэтиламид каприловой кислоты

Диэтиламид октановой кислоты, Sigaride (Roure), Repellent 790 (Merck). — $C_{12}H_{25}ON$; 199,34

Запах — свежий, пряный, слегка фруктовый, нота запаха сигарного ящика. Жидкость.

Продажный продукт Roure (1985) имеет d_{20}^{20} ~0,875; n_D^{20} ~1,450; т. всп. 123°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Продукт придает изделиям репеллентные свойства. Ограничений IFRA нет.

Может быть получен взаимодействием хлорангидрида каприловой кислоты с диэтиламином.

1.178. Дибутилсульфид

Бутилсульфид, Dibutyl sulfide (Arc. 890, RIFM, IFF) — $C_8H_{18}S$; 146,29

C. A. 544-40-1

Запах — очень сильный, "сернистый", при разбавлении — зелени, листьев фиалки, герани. Жидкость, т. кип. 182°C; d_4^{20} 0,840, γ_{20} 27,2 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 2,22 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) дибутилсульфида и имеет d_4^{20} 0,834–0,842; n_D^{20} 1,450–1,455; т. всп. 67°C.

Может быть получен взаимодействием бутилбромида или бутилхлорида с сульфидом натрия при кипячении в этиловом спирте.

Используют в ограниченном числе парфюмерных композиций и отдушек в микродозах, обычно не превышающих 0,1%. Ограничений IFRA нет.

2. АЦИКЛИЧЕСКИЕ ТЕРПЕНОИДЫ

2.1–2.31. Углеводороды и спирты
2.32–2.63. Альдегиды, ацетали, кетоны
2.64–2.102. Сложные эфиры
2.103–2.117. Простые эфиры, оксиды, нитрилы

2.1–2.31. УГЛЕВОДОРОДЫ И СПИРТЫ

2.1. Мирцен

2-Метил-6-метилен-2,7-октадиен, Myrcene (Arc. 2283), Myrcene PQ (BBA) — $C_{10}H_{16}$; 136,24

С. А. 123-35-3

Входит в состав очень многих ЭМ, в том числе лемонграссового, кориандрового, эвгенольно-базиликового и других. Запах — приятный бальзамический со свежей цитрусовой нотой. Жидкость, т. кип. 171°С/1013 гПа; 54°С/14,6 гПа.

Продажный продукт BBA (1990) содержит не менее 90% (ГЖХ) мирцена и имеет d_{20}^{20} 0,792–0,798; n_D^{20} 1,469–1,474; т. всп. 37°С.

Для препаративных целей мирцен получают дегидратацией линалоола в присутствии небольших количеств иода.

Промышленный способ получения мирцена состоит в пиролизе *бета*-пинена (Rienaecker R., Brennst.-Chemie, 1964, **45**, № 7, 206, РЖХ, 1965, 21Ж343; Войткевич С. А. и др., Масло-жировая пром-сть, 1971, № 12, с. 24). Получаемый при этом технический продукт может использоваться как для получения гераниола, линалоола и их производных, так и для введения в диеновый синтез с акролеином, метилвинилкетоном и другими диенофилами.

Для приготовления продукта парфюмерного качества (PQ в обозначении BBA) требуется тщательная очистка. Мирцен используется в небольших количествах в парфюмерных композициях и отдушках.

2.2. Оцимен

3,7-Диметил-1,3,6-октатриен, Ocimene (Arc. 2388, RIFM, IFF), Ocimene PQ (BBA). — $C_{10}H_{16}$; 136,24

С. А. 13877-91-3

Содержится в базиликовом, лавандовом, лавандиновом, мускатно-шалфейном и других ЭМ. Запах — цветочно-травянистый с нотой неролиевого масла. Жидкость, т. кип 176–178°С/1013 гПа,

63°С/13,3 гПа. Смесь *цис-транс*-изомеров. Легко окисляется и осмоляется на воздухе.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Состав изомеров (ГЖХ), %		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
	цис–	*транс–*				
BBA, 1990	69–74	—	~0,800	20/20	~1,487	57
IFF, 1992	20–40	50–70	0,796–0,804	25/25	1,484–1,492	56

Может быть получен из *альфа*-пинена кратковременным пиролизом или фотосенсибилизированной изомеризацией. Для приготовления продукта, пригодного для парфюмерии, требуется тщательная очистка.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

2.3. Аллооцимен

2,6-Диметил-2,4,6-октатриен, Allo-ocimene (Arc. 59), Allo-ocimene PQ (BBA), 2,6-Dimethyl-2,4,6-octatriene (RIFM) — $C_{10}H_{16}$; 136,24

С. А. 3016-19-1

Содержится в некоторых сортах гераниевого и других ЭМ. Образуется при нагревании оцимена. Легко окисляется на воздухе. Запах — свежей травы, резкий. Жидкость. Смесь изомеров, т. кип. 188–192°С/1013 гПа; (4E, 6Z)-изомер (А) — т. кип. 89°С/27 гПа; d_4^{20} 0,806; (4E, 6E)-изомер (Б) — т. кип. 91°С/27 гПа; d_4^{20} 0,812.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} 1,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,4 г/кг (кролики).

Продажный продукт BBA (1990) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров аллооцимена, в том числе 80% изомера (А), и имеет d_4^{20} ~0,810; n_D^{20} ~1,542; т. всп. 40°С.

Промышленный метод получения аллооцимена состоит в пиролизе *альфа*-пинена на специальной установке при температуре 390–460°C (В. Г. Черкаев и др.; авт. свид. 1490107, 31.07.87 — 30.06.89, РЖХ, 1989, 24Н9П). В РФ технический аллооцимен используют в качестве полупродукта синтеза эленола, элесанта и некоторых продуктов диенового синтеза.

Для приготовления аллооцимена парфюмерного качества требуется его тщательная очистка. Используется для промышленных отдушек и отдушек товаров бытовой химии.

2.4. Фарнезен

3,7,11-Триметил-1,3,6,10-додекатетраен, $C_{15}H_{24}$; 204,36
Farnesene (Arc. 1379, Wacker), Secquicitronellen.

C. A. 502-64-1

Содержится в апельсиновом, розовом и иланг-иланговом ЭМ. Запах — цветов и зелени, бальзамический, стойкий. Жидкость, т. кип. 138–140°C/12 гПа; 105°C/4,3 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Wacker (1987) имеет т. кип. 80–110°C/3 гПа; d_4^{20} ~0,85; n_D^{20} 1,495–1,505; т. всп. 95–100°C.

Может быть получен дегидратацией неролидола с различными кислыми катализаторами. Иногда содержит до 25% бисаболена.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.5. Гераниол

транс-3,7-Диметил-2,6-октадиенол, (E)-3,7-диметил-2,6-октадиенол, Geraniol (Arc. 1426, RIFM, BBA, H.+R., IFF), Rosoflor-2 (GIV), Meranol (BBA). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 106-24-1

Содержится в пальмарозовом, гераниевом, розовом, цитронелловом и многих других ЭМ. Запах — цветочный, подобный запаху розы. Жидкость, т. кип. 230°C/1013 гПа; 98°C/13,3 гПа; 93°C/5,3 гПа, P_{20} $2{,}7 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 29,6 дин/см; σ_{20} 8,8 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974). oral LD_{50} 3,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание спиртов (ГЖХ), %	Состав, %			$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}
		Гераниол	Нерол	Цитронеллол			
GIV, 1986, Rosoflor-2	98	98	—	—	0,877-0,881	20/4	1,475-1,479
BBA, Geraniol-palmarosa	—	96	2	—	0,877-0,883	20/20	1,476-1,478
BBA, Meranol	99	98	—	—	~0,878	20/20	~1,477
BBA, Geraniol 980, pure	99	97	3	—	~0,877	20/20	~1,477
BBA, Geraniol 8020	98	80	21	—	~0,876	20/20	~1,478
BBA, Geraniol 7030A	98	70	31	—	~0,876	20/20	~1,476
BBA, Geraniol 600	97	58	39	—	~0,876	20/20	~1,476
BBA, Geraniol 5020 98TA	98	49	28	18	~0,871	20/20	~1,473
BBA, Geraniol 500j	60	38	—	—	—	—	—
BBA, Geraniol soap 5139	—	—	—	—	~0,891	20/20	~1,478
РФ, 1990	90	>50	—	—	~0,880	20/4	1,469-1,479
H.+R., 1988 Geraniol N	95	>95	—	—	0,876-0,880	25/25	1,475-1,479
IFF, 1992 Geraniol NC	97	>82	<18	—	0,876-0,884	20/4	1,474-1,479
IFF, 1992 Geraniol RG	96	50–70	25–45	—	0,875-0,883	20/4	1,473-1,478
IFF, 1992 Geraniol synth.	95	50–70	5–20	20–35	0,868-0,876	20/4	1,467-1,473
IFF, 1992 Geraniol abs.	90	50–70	<5	20–40	0,869-0,877	20/4	1,470-1,476

Для всех сортов гераниола т. всп. имеет пределы 100–103°С. Под названием "гераниол" с дополнительной маркировкой (W, for soap и др.) иногда реализуются смеси терпеновых спиртов — отходы переработки эфирных масел. Они содержат обычно меньше 50% гераниола. Получение гераниола основано на выделении его из эфирных масел или осуществляется синтетически.

Классический способ выделения гераниола из пальмарозового масла путем его омыления и фракционированной дистилляции находит все меньшее применение из-за дороговизны масла, хотя дает превосходный по парфюмерному качеству продукт.

Способ выделения гераниола из цитронеллового масла путем вакуум-ректификации (а иногда обработки борной кислотой и перегонки) остается важным производственным способом, тем более что специалисты парфюмеры привыкли к запаху такого гераниола, который является смесью гераниол — нерол — цитронеллол.

Промышленный синтез гераниола может быть осуществлен по двум схемам.

В первой схеме используется продукт пиролиза *бета*-пинена — технический мирцен. Он превращается в смесь геранил-, нерил- и линалилхлоридов, а затем в смесь соответствующих ацетатов. Вакуум-ректификация такой смеси и последующее омыление позволяют получать достаточно чистые гераниол, нерол и линалоол.

Вторая схема предусматривает изомеризацию синтетического линалоола, полученного из пинана или из дегидролиналоола, в гераниол под действием ванадиевых или молибденовых катализаторов (Ninagawa Y. и др., пат. США 4006193, 12.03.73. — 1.02.77, РЖХ, 1977, 21Р515П, Kane B. Y., пат. США 4254291, 22.08.79. — 3.03.81, РЖХ, 1981, 21Р435П, Шутикова Л. А. и др., авт. свид. 1696420, 4.12.87–7.12.91, РЖХ, 1993, 2Н16П).

Гераниол в больших количествах используется при производстве парфюмерных композиций и разнообразных отдушек. Доза ввода в композиции достигает 30%. Ограничений IFRA нет.

Гераниол является также исходным продуктом для получения многих ДВ.

2.6. Нерол

цис-3,7-Диметил-2,6-октадиенол, (Z)-3,7-диметил-2,6-октадиенол, Nerol (Arc. 2315, RIFM. GIV, IFF, BBA), Lorena (Firm., устаревш.), Vernol (BBA).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 106-25-2

Содержится в неролиевом, розовом, цитронелловом, бергамотном и других ЭМ. Запах — приятный, подобный запаху розы, свежий с

оттенками зелени, цитрусов. Жидкость, т. кип. 224–225°С/993 гПа, 105°С/16 гПа; P_{20} 3,3·10^{-2} гПа; σ_{20} 7,05 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание спиртов (ГЖХ), %	Состав, %		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
		Нерол	Гераниол				
GIV, 1987 Nerol extra	95	90	10	0,875-0,880	20/4	1,473-1,477	92
GIV, 1987 Nerol C	90	45–60	33–53	0,875-0,880	20/4	1,474-1,478	92
H.+R., 1988 Nerol N	95	Не указано		0,873-0,879	25/25	1,471-1,476	>100
IFF, 1992 Nerol BG	95	70–90	10–30	0,873–0,881	20/4	1,473–1,477	91
IFF, 1992 Nerol G	90	20–50	40–70	0,875 0,883	20/4	1,473–1,478	>100
IFF, 1992 Nerol coeur	95	47–57	40–50	0,876–0,884	20/4	1,473-1,478	>100
IFF, 1992 Nerol OM	95	20–50	40–70	0,876–0,884	20/4	1,473–1,478	>100
IFF, 1992 Nerol reg.	90	38–42	56–62	0,878–0,886	20/4	1,474–1,478	91
BBA, Vernol	98	96	—	~0,876	20/20	~1,475	103
BBA, Nerol 900A	98	90	7	~0,875	20/20	~1,475	>100
BBA, Nerol 850	—	83	15	~0,876	20/20	~1,475	>100
BBA, Nerol 600	97	59	41	~0,877	20/20	~1,475	>100

Для промышленного получения нерола чаще всего используют способ вакуум-ректификации смесей гераниол — нерол, получаемых синтетическим путем. Небольшая разница температур кипения (~5°С при атмосферном давлении) требует использования при ректификации колонн высокой эффективности.

Применявшийся прежде при исследовании ЭМ способ разделения смесей гераниол — нерол путем обработки хлористым кальцием для связывания гераниола дает лишь частичное обогащение смеси неролом.

При каталитическом гидрировании цитраля на медно-хромовом катализаторе удается получить смесь 45% нерола, 40% гераниола и 15% цитронеллола, запах которой близок к запаху высокопроцентного нерола (В. Г. Черкаев и др., Масло-жировая пром-сть, 1980, № 4, с. 31).

Нерол, особенно синтетический, широко используется в парфюмерных композициях и отдушках. Дозировка обычно не превышает 20%. Ограничений IFRA нет.

2.7. Цитронеллол, родинол

3,7-Диметил-6-октенол, *бета*-цитронеллол, Citronellol (Arc. 669, 670, RIFM, BBA, BASF, H.+R., IFF), Rhodinol (GIV, BBA, H.+R., IFF, TAK), Cephrol (BBA)

$C_{10}H_{20}O$; 156,27

С. А. 106-22-9; 7540-51-4

Содержится в розовом, цитронелловом, гераниевом и многих других ЭМ. Запах — свежий, цветочный (розы, герани). Жидкость, т. кип. 225°C/1013 гПа; 124–125°C/20 гПа; P_{20} 1,2 · 10^{-2} гПа; γ_{20} 27,4 дин/см; σ_{20} 12,0 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1975) для цитронеллола: oral LD_{50} 3,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,7 г/кг (кролики). Для родинола (данные IFF, 1992): oral LD_{50} >5 г/кг, derm. LD_{50} 3,6 г/кг.

Коммерческий цитронеллол

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание спиртов (ГЖХ), %	Состав, %				d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
		Цитронеллол	Гераниол	Нерол	Тетрагидрогераниол			
BBA, Cephrol	—	96	—	—	—	~0,855	~1,456	>100
BBA, laevo-Citronellol	—	97	—	—	—	~0,856	~1,455	106
BBA, Citronellol 950	99	95	—	—	—	~0,856	~1,458	>100
BBA, Citronellol 850	97	84	Суммарно 16		—	~0,858	~1,457	96

Продолжение табл.

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание спиртов (ГЖХ), %	Состав, %				d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
		Цитронеллол	Гераниол	Нерол	Тетрагидрогераниол			
BBA, Citronellol 700UC	98,5	70	Суммарно 15		<19	~0,855	~1,457	92
BBA, Citronellol 700981A	98	69	<10	<21	<8	~0,857	~1,458	96
BASF, 1988	—	96	—	—	—	0,855–0,860	1,454–1,459	107
H.+R., 1988 N-supra	—	95	—	—	—	0,853–0,857	1,454–1,458	112
IFF, 1992 extra	90	65–85	<12	<12	<15	0,852–0,860	1,455–1,461	>100
IFF, 1992 coeur	90	60–75	<12	<12	5–20	0,851–0,860	1,454–1,450	>100
IFF, 1992 regular	90	55–75	<12	<12	5–20	0,851–0,859	1,453–1,458	81
РФ, 1990	98	80	—	—	—	~0,856	1,454–1,457	96

Родинолом (С. А. 141-25-3; 68916-43-8) называют (–)-цитронеллол в смеси с гераниолом и другими спиртами. Некоторые сорта родинола содержат 3,7-диметил-7-октенол (*альфа*-цитронеллол).

Коммерческий родинол и (–)-цитронеллол

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	$[\alpha]_D^{20}$	Дополнительные данные
GIV, 1984 Rhodinol 70	97	0,851–0,855	20/4	1,451–1,456	—	$\alpha + \beta$-формы
H.+R., 1988 Citronellol L	80	0,870–0,878	25/25	1,465–1,470	-6°÷-10°	—

16-5414

Продолжение табл.

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	$[\alpha]_D^{20}$	Дополнительные данные
TAK, 1987 l-Citronellol	98	0,850–0,860	25/25	1,453–1,463	-5°	—
IFF, 1992 Rhodinol coeur	80	0,865–0,873	20/4	1,465–1,470	—	Цитронеллол 40–60% гераниол 20–40% нерол <10%
BBA, Rhodinol florex	80	~0,865	20/4	~1,462	-3,7°	—

Традиционным способом производства цитронеллола является селективное гидрирование так называемой "гераниольной" фракции цитронеллового масла. Возможно также его получение гидрированием цитронеллаля, выделенного из того же ЭМ, или гидрированием масла лимонного эвкалипта (*Eucalyptus citriodira*).

Синтетический (±)-цитронеллол получают гидрированием синтетических гераниола или цитраля.

Родинол получают обычно вакуум-ректификацией омыленного гераниевого масла.

(–)-Цитронеллол может быть получен гидроксилированием по Циглеру (+)-3,7-диметил-1,6-октадиена — продукта пиролиза (+)-пинана (Rienaecker R., Ohloff G., Angew. Chem. 1961, 73, № 7, 240).

Цитронеллол широко применяется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. В больших дозах (до 50%) используется при создании цветочных композиций. Ввод родинола в композиции обычно не превышает 10%, что связано главным образом с его дороговизной. Ограничений IFRA нет. Значительные количества цитронеллола используются для производства гидроксицитронеллаля.

2.8. Тетрагидрогераниол

3,7-Диметилоктанол, Dimethyl octanol (Arc. 1032, IFF), 3,7-Dimethyl-1-octanol (RIFM), Pelargol (GIV)

$C_{10}H_{22}O$; 158,28

OH

С. А. 106-21-8

Найден в цитрусовых маслах.

Запах цветочный, подобный запаху восков розы. Жидкость, т кип 212–213°C/1013 гПа; 118°C/20 гПа; 98–99°C/12 гПа; γ_{20} 25,5 дин/см; σ_{20} 15,0 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,4 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1987	92	0,827–0,833	1,435–1,440	89
IFF, 1992	95	0,825–0,833	1,434–1,440	88
РФ, 1992	85	~0,830	1,439–1,444	—
BBA, 1990	93	~0,834	~1,435	100

Обычно получают каталитическим гидрированием цитраля, гераниола или лемонграссового масла. Содержится в виде примеси в коммерческих сортах цитронеллола.

Используется в парфюмерных композициях и различных отдушках. Все больше используется в отдушках для товаров бытовой химии из-за устойчивости к окислителям. Ограничений IFRA нет.

2.9. Гидроксицитронеллол

3,7-Диметилоктан-1,7-диол, гидроксидигидроцитронеллол, Hydroxycitronellol (Arc. 1737, RIFM, GIV, BASF) Hydroxyol (IFF).

$C_{10}H_{22}O_2$; 174,29

OH

OH

С. А. 107-74-4

Запах — слабый цветочный с оттенком запаха розы, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 268–271°C/1013 гПа; 140–145°C/16 гПа; σ_{20} 291,6 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	0,922–0,930	25/25	1,455–1,460	>100	Содержание альдегида <10%
BASF, 1987	98	0,922–0,930	25/25	1,457–1,461	151	—
IFF, 1992	97	0,926–0,934	20/4	1,457–1,461	>100	—

Производство гидроксицитронеллола осуществляется гидратацией цитронеллола в присутствии ионообменных смол (Hoffmann W., заявка ФРГ 2755945, 15.02.77–21.06.79. РЖХ, 1980, 9Р514П; Pavlin M. S., пат. США 4482765, 24.06.83–13.11.84, РЖХ, 1985, 21Р559П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет. В больших количествах применяется в качестве полупродукта синтеза гидроксицитронеллаля.

2.10. Линалоол

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-ол, Linalool (Arc. 1803, RIFM, GIV, BASF, H.+R.), Phantol (BBA), Petitgrainol (IFF)

$C_{10}H_{18}O$; 154.25

OH

С. А. 78-70-6; 126-90-9

(−)-Линалоол входит в состав ЭМ розового дерева, лаванды, лавандина, мускатного шалфея и других. (+)-Линалоол содержится кориандровом и в некоторых других ЭМ.

Запах — сильный цветочный с древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 198°С/1013 гПа; 97–98°С/27 гПа; P_{20} 0,19 гПа; γ_{20} 28,0 дин/см; σ_{20} 5,6 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,8 г/кг (крыс' derm. LD_{50} 5,6 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	Synthetic	96	0,859–0,863	20/4	1,460–1,464	78
BASF, 1987	—	95	0,858–0,867	25/25	1,461–1,465	75
BBA, 1990	Bois de rose	—	0,865–0,875	20/20	1,460–1,465	74
BBA, 1990	Phantol	98	0,861–0,863	20/20	1,462–1,464	77
BBA, 1990	Linalol	96	0,859–0,863	20/20	1,460–1,464	77
BBA, 1990	Linalol 95	93	~0,865	20/20	~1,463	80
H.+R., 1988	—	86	0,858–0,861	25/25	1,460–1,464	78
IFF, 1992	Petitgrainol	97	0,877–0,887	20/4	1,460–1,465	77
РФ, 1990	—	97	0,860–0,875	20/4	1,461–1,463	82

Традиционные методы получения путем выделения линалоола из ЭМ (розового дерева, кориандрового, петигреневого) имеют все меньшее промышленное значение из-за дороговизны ЭМ.

Производство синтетического линалоола достигло размеров нескольких десятков тысяч тонн в год и обычно комбинируется с производством витаминов A и E (Clark G. S., Perfumer and Flavorist, 1988, 13, № 8–9, 40). Селективное каталитическое гидрирование дегидролиналоола — полупродукта синтеза витаминов — дает линалоол хорошего парфюмерного качества (GIV, BASF).

Существовавший с 50-х годов способ получения линалоола исходя из *бета*-пинена:

Cl

O

O

OH

вытеснен способом получения линалоола пиролизом пинан-2-ола (Ohloff G. и др., пат. ФРГ 1150974, 03.07.61–16.01.64, РЖХ 1965, 4P395П; Tetrahedron 1962, **18**, 37). Пинан-2-ол в свою очередь может быть получен по схеме:

Линалоол широко используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет. Является важным полупродуктом синтеза душистых веществ и витамина Е.

2.11. Дегидролиналоол

3,7-Диметил-1-октин-6-ен-3-ол, Dehydrolinalool (Arc. 870, BASF). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

Запах — цветочно-травянистый с пряным и лавандовым оттенками. Жидкость, т. кип. 89–93°C/16 гПа; 76°C/6,5 гПа. Парфюмерный дегидролиналоол, вырабатываемый BASF (1982), имеет чистоту ⩾99%, d_{25}^{25} 0,876–0,880; n_D^{20} 1,451–1,455; т. всп. 79°C.

Используется в ограниченном числе парфюмерных композиций и отдушек. Технический дегидролиналоол (92–96%-ный) вырабатывается в больших количествах и служит полупродуктом синтеза линалоола, цитраля, ионона и витаминов А и Е. Его получают этинилированием 6-метил-5-гептен-2-она в присутствии едкого калия в среде жидкого аммиака или толуола с добавкой бутанола или в среде N-метилпирролидона:

2.12. Дигидролиналоол

3,7-Диметил-6-октен-3-ол, Dihydro linalool (Arc. 960), Dihydrolinalool (GIV, IFF). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

C. A. 2270-57-7; 18479-49-7

Запах — свежий, цветочный с цитрусовым оттенком. Жидкость, т. кип. 201°C/1013 гПа.

Коммерческие продукты

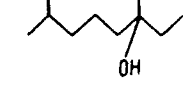
Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	98	0,852–0,856	20/4	1,452–1,456	80
KHP, 1990	94	0,855–0,859	20/20	1,456–1,457	80
IFF, 1992	95	0,850–0,858	20/4	1,452–1,456	82

Простейший путь синтеза — селективное каталитическое гидрирование линалоола.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках. Обычная дозировка составляет 1–10%, возможно вводить до 30%. Ограничений IFRA нет.

2.13. Тетрагидролиналоол

3,7-Диметилоктан-3-ол, Tetrahydro linalool (Arc. 2913, IFF, GIV), Tetrahydrolinalool (RIFM, BASF). $C_{10}H_{22}O$; 158,29



C. A. 78-69-3

Запах — цветочный, приятный, менее древесный, чем запах линалоола. Жидкость, т. кип. 197–198,5°C/1013 гПа; 78–79°C/13 гПа. Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	98	0,825–0,830	20/4	1,432–1,436	86
BASF, 1987	99,5	0,823–0,829	25/25	1,431–1,435	81
IFF, 1992	98	0,824–0,832	20/4	1,432–1,436	84
РФ, 1990	98	0,825–0,835	20/4	1,430–1,435	—

Получают исчерпывающим каталитическим гидрированием дегидролиналоола или линалоола. Более устойчив к окислению, чем линалоол.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ввод в композиции — до 30%. Ограничений IFRA нет.

2.14. Этиллиналоол

3,7-Диметил-1,6-нонадиен-3-ол, Ethyl linalool (Arc. 1279, RIFM, GIV). $C_{11}H_{20}O$; 168,28

OH

C. A. 10339-55-6

Запах — свежий цветочный, более стойкий и мягкий, чем запах линалоола.

Продажный этиллиналоол, вырабатываемый GIV, по данным RIFM (1976), имеет острую токсичность: oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики). Он представляет собой жидкость с d_4^{20} 0,859–0,865; d_{25}^{25} 0,858–0,864; n_D^{20} 1,462–1,466; т. всп. 86°С; чистота ≥95% (сумма двух изомеров).

Промышленное получение этиллиналоола, вероятно, осуществляется по методу Соси-Марбета (швейц. пат. 416596, 11.07.62–31.01.67, РЖХ, 1968, 5Р482П; Helv. chim. acta 1967, 50, № 7, 2091, РЖХ, 1968, 11Ж143) из метилэтилвинилкарбинола с последующим превращением этилгептенона в "этилдегидролиналоол" и селективным гидрированием:

OH + OCH₃ → O →

→ OH → OH

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 40%. Ограничений IFRA нет.

2.15. Мирценол

2-Метил-6-метилен-7-октен-2-ол, Myrcenol (Arc. 2284, IFF, RIFM), Myrcenol 50 (IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

OH

C. A. 543-39-5

Найден в китайском лавандовом и некоторых других ЭМ.

Запах — свежий цветочный с оттенком запаха лайма. Жидкость, т. кип. 99°С/13 гПа; $d_{20}^{20} \sim 0,871$ и $n_D^{20} \sim 1,473$.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 5,3 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный "Myrcenol 50", вырабатываемый IFF (1992), представляет собой раствор мирценола в диэтилфталяте; содержание мирценола (ГЖХ) 48–52%; d_4^{20} 0,974–0,983; n_D^{20} 1,480–1,487; т. всп. 89°С.

Один из возможных путей получения мирценола — омыление соответствующего гидрохлорида мирцена (Blumenthal J. H., пат. США 3413364, 9.03.66–26.11.68, РЖХ, 1970, 2Р492П).

Мирценол используется в парфюмерных композициях при дозировке до 10%. Особенно хорош для одеколонов.

2.16. Дигидромирценол

2,6-Диметил-7-октен-2-ол, Dihydro myrcenol (Arc. 964), Dihydromyrcenol (RIFM, IFF, BBA, H.+R., Quest), Dimyrcetol (IFF, BBA), Limolene (IFF). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

OH

C. A. 18479-58-8; 53219-21-9

Запах — свежий цветочно-цитрусовый с оттенком запаха лаванды. Жидкость, т. кип. 77–79°С/13 гПа; $P_{20}9,3 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность: по RIFM (1974) — oral LD_{50} 3,6 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики); по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 4,0 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
IFF, 1992	98	0,831–0,839	20/4	1,438–1,443	74	—
IFF, 1992	45–55	0,800–0,815	20/4	1,440–1,447	43	Limolene, дигидромирцен — 20–40%
IFF, 1992	35–50	0,858–0,866	20/4	1,434–1,439	64	Dimyrcetol, формиат — 40–60%.
BBA, 1990	96	0,831	20/20	1,443	76	—
BBA, 1990	68	0,846	20/20	1,439	75	Dimyrcetol, формиат ~31%
Quest, 1989	98	0,834–0,837	20/4	1,440–1,442	79	—
H.+R., 1988	98	0,830–0,834	25/25	1,439–1,443	81	—
РФ, 1990	75	0,834–0,841	20/4	1,438–1,440	—	ацетат ~10%

Промышленные способы производства основаны или на гидрохлорировании дигидромирцена (3,7-диметил-1,6-октадиена), получаемого пиролизом пинана, и последующем омылении, или на образовании формиатов (ацетатов) и их гидролизе (Blumenthal J. H., заявка ФРГ 1668280, 12.10.67–11.02.71).

Дигидромирценол используется для получения парфюмерных композиций и различных отдушек, особенно отдушек для туалетного мыла при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.17. Тетрагидромирценол

2,6-Диметилоктан-2-ол, Tetrahydromyrcenol (Arc. 2920), Tetrahydro myrcenol (IFF). $C_{10}H_{22}O$; 158,29

C. A. 18479-57-7

OH

Запах — цветочно-цитрусовый, приятный. Жидкость, т. кип 82°С/13 гПа; $P_{20}5,8 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) тетрагидромирценола и имеет d_4^{20} 0,822–0,830; n_D^{20} 1,432–1,437; т. всп. 81°С.

Получают каталитическим гидрированием дигидромирценола. Гидратацией аллооцимена и последующим каталитическим гидрированием получают так называемый тетрагидромюгол — смесь тетрагидромирценола и тетрагидролиналоола.

Тетрагидромирценол используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

2.18. Оцименол

2,6-Диметил-5,7-октадиен-2-ол, Ocimenol (Arc. 2389, IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 5986-38-9

OH

Запах — свежий цветочный с оттенками запаха лайма, зелени. Жидкость, т. кип. 196°С/1013 гПа; 97°С/13 гПа, смесь (E)-, (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 1,7 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики). Продукт вырабатываемый IFF, содержит минимум 90% (ГЖХ) изомеров оцименола (транс- — 45–62%, цис- — 20–40%, мирценола — до 10%) и имеет d_4^{20} 0,871–0,879; n_D^{20} 1,482–1,488; т. всп. 89°С.

Простейший путь получения — гидратация оцимена смесью уксусной и серной кислот.

Оцименол используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

2.19. Эленол

3,7-Диметил-6-октен-2-ол, Elgenol (GIV), Elenol (РФ). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

OH

Запах — приятный цветочный с древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 77–78°С/6,7 гПа; 68–70°С/2 гПа; $P_{20}4,9 \cdot 10^{-2}$ гПа; d_4^{20} 0,857; n_D^{20} 1,455.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral LD_{50} 9,5 г/кг (крысы, мыши). Химическое строение установлено Навом и др. (Naves Y.-R., Bull. Soc. chim. Fr. 1956, 1768), которые назвали продукт "эльженолом".

Промышленный синтез осуществляется в СССР начиная с 1962 г. по схеме аллооцимен — диэпоксид — 3,7-диметилоктан-2,7-диол — эленол.

Ключевой стадией является безопасное получение диэпоксида (В. Г. Черкаев и др., авт. свид. 189838, 23.11.63–28.01.67, РЖХ, 1968, 1Н59П; труды ВНИИСНДВ, вып. VII, 1965, с. 11). Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит ≥95% эленола и имеет n_D^{20} 1,453–1,455, т. всп. 90°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

2.20. Элесант

3,7-Диметил-7-метоксиоктан-2-ол, Osyrol (BBA), Sandaler (KHP), Elesant (РФ). $C_{11}H_{24}O_2$; 188,31

С. А. 41890-92-0

Запах — санталового дерева с цветочным оттенком.

Впервые получен и запатентован BBA последовательными: взаимодействием дигидромирцена с метанолом, эпоксидированием метоксипроизводного и каталитическим гидрированием эпоксида (Jones B. N. и др., англ. пат. 1414458, 12.11.71–19.11.75, РЖХ, 1976, 17Р645; Derfer J. M., Perfumer a. Flavorist, 1978, 3, № 2-3, с 45). В СССР осуществлен вариант катализируемого кислотами присоединения метанола к эленолу — 3,7-диметил-6-октен-2-олу (И. С. Аульченко и др., авт. свид. 857103.21.07.79–23.08.81, Масло-жировая пром-сть, 1983, № 7, с. 29). Жидкость.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
BBA, Osyrol	95	~0,898	20/20	~ 1,446	> 110
РФ, Элесант	95	0,899–0,906	20/4	1,445–1,447	110
KHP, Sandaler	95	0,898–0,910	20/20	1,446–1,449	110

Продукт используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.21. Аллооцименол

Смесь 2,6-диметил-3,5-октадиен-2-ола и 3,7-диметил-4,6-октадиен-3-ола, Allo-ocimenol (Arc. 1030, RIFM), Muguol (IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 18479-54-4; 22451-63-4

Запах — цветочный, более свежий, чем запах линалоола, легкая цитрусовая нота. Жидкость, т. кип. 70°С/4 гПа; n_D^{20} 1,491.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,2 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики). IFF вырабатывает продукт двух сортов: Muguol — чистота ≥90% (сумма изомеров), d_4^{20} 0,866–0,874; n_D^{20} 1,489–1,494; т. всп. 85°С; Muguol extra — чистота ≥90% (сумма изомеров), d_4^{20} 0,865–0,873; n_D^{20} 1,487–1,496; т. всп. 83°С.

По патентным данным (Theodore E., швейц. пат. 380101, 16.09.58–15.09.64, РЖХ, 1966, 12Р472П), получается гидрохлорированием аллооцимена и немедленным омылением образующейся смеси гидрохлоридов.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.22. Тетрагидроаллооцименол

Смесь 2,6-диметилоктан-2-ола и 3,7-диметилоктан-3-ола, смесь тетрагидромирценола (I) и тетрагидролиналоола (II), Tetrahydro muguol (Arc. 2918, RIFM, IFF), Linacsol (TAK). $C_{10}H_{22}O$; 158,29

C. A. 18479-57-7; 41678-36-8

Запах — свежий цветочно-цитрусовый с камфарным оттенком. Жидкость, т. кип. 196–200°C/1013 гПа, 78–82°C/13 гПа. Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Состав, %		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
		I	II				
IFF, 1992 Tetrahydro muguol	80	30–50	35–55	0,836–0,844	20/4	1,436–1,442	80
IFF, 1992 Tetrahydro muguol coeur	80	45–55	35–55	0,830–0,838	20/4	1,435–1,440	80
TAK, 1987 Linacsol	90	—	—	0,830–0,840	20/20	1,430–1,440	84

Получают исчерпывающим каталитическим гидрированием аллооцименола.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в дозировке до 40% Особенно хорош в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

2.23. Лавандулол

2,6-Диметил-3-гидроксиметил-1,5-гептадиен, 2-изопропенил-5-метил-4-гексенол, Lavandulol (Arc. 1794, IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

Содержится в лавандовом и лавандиновом ЭМ.

Запах — цветочно-травянистый с легкой пряной нотой. Жидкость, т. кип. 203°C/1013 гПа; 100–101°C/21 гПа; 94–95°C/17 гПа; 88°C/13 гПа; d_4^{20} 0,874; n_D^{20} 1,466.

Продукт, вырабатываемый IFF, содержит не менее 90% (ГЖХ) лавандулола и имеет n_D^{20} 1,467–1,477.

Описано несколько вариантов получения лавандулола синтетическим путем. Самый простой состоит во взаимодействии 2,6-диметил-2,5-гептадиена с параформом по реакции Принса:

(Cookson R. C., Mirza N., Synth. Comm. 1981, **11**, № 4,299, РЖХ, 1981, 16E22).

Используется в сравнительно небольших количествах. Ввод в парфюмерные композиции не превышает 10%. Ограничений IFRA нет.

2.24. 2,7-Диметилоктан-2-ол

Диметилоктан-2-ол, 2,7-Dimethyl octan-2-ol. $C_{10}H_{22}O$; 158,29

Запах — интенсивный цветочный, напоминает запах линалоола. Жидкость, т. кип. 87°C/13 гПа; 57–60°C/6,7 гПа; n_D^{20} 1,433.

Продажный продукт (РФ) содержит ≥95% диметилоктан-2-ола и имеет n_D^{20} 1,428–1,432.

Простейший способ получения — димеризация диметилэтинилкарбинола и последующие гидрирование 2,7-диметил-3,5-октадиин-2,7-диола, частичная дегидратация насыщенного диола и повторное гидрирование (А. В. Гуревич и др., Масло-жировая. пром-сть, 1980, № 10,

с 29) Другие методы (например, А. В. Гуревич и др., Масло-жировая пром-сть, 1978, № 9, с. 26 или Л. И. Захаркин, Е. А. Петрушкина, авт. свид. 1498751, 13.04 87-07.08.89, РЖХ, 1990, 5Н14П) менее привлекательны.

Может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках.

2.25. Триметилундекадиенол

2,6,10-Триметил-5,9-ундекадиенол, 3-геранил-2-метилпропанол, Profarnesol (Н.+R.). $C_{14}H_{26}O$; 210,36

С. А. 58001-88-0

Запах — цветочный (ландыша) с оттенками запаха орхидеи, фруктов.

Н.+R. (1988) вырабатывает продукт, содержащий минимум 98% (ацетил.) спирта и имеющий d_{25}^{25} 0,869–0,877; n_D^{20} 1,474–1,479; т. всп. >100°С. Может быть получен восстановлением триметилундекадиеналя. Применяется при составлении дорогих парфюмерных композиций. Ограничений IFRA нет.

2.26. Эженол

2,2,5,9-Тетраметил-4,8-декадиенол, 2-геранил-2-метилпропанол, Egenol (РФ). $C_{14}H_{26}O$; 210,26

Запах — элегантный цветочно-древесный с оттенком запаха зелени. Жидкость, т. кип. 93-96°С/2,7 гПа; $P_{20}1,3 \cdot 10^{-3}$ гПа; d_4^{20} 0,877; n_D^{20} 1,475. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ, содержит минимум 92% эженола и имеет n_D^{20} 1,474-1,476.

Производство эженола осуществляют каталитическим гидрированием эженаля (С. А. Войткевич и др., авт. свид. 523073, 25.06.70–30.07.76).

Применяется в парфюмерных композициях.

2.27. Неролидол

3,7,11-Триметил-1,6,10-додекатриен-3-ол, Nerolidol (Arc. 2316, RIFM, GIV, BASF). $C_{15}H_{26}O$; 222,38

С. А. 7212-44-4

Содержится в перуанском бальзаме, а также в неролиевом, петигреневом, иланг-иланговом, жасминовом и др. ЭМ.

Запах — нежный цветочный с оттенками запаха зелени, розы, лилии. Жидкость, т. кип. 260-266°С/1013 гПа, 145°С/16 гПа, 99–101°С/1,3 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Способ синтеза неролидола впервые опубликован Л. Ружичкой (Helv. chim. acta, 1923, 6, 492). Производство неролидола осуществляют из линалоола по одной из схем, принятых при производстве витамина Е, поскольку неролидол является полупродуктом синтеза последнего. Любая из этих схем предусматривает превращения: линалоол-геранилацетон-дегидронеролидол-неролидол.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	96	0,870–0,876	1,478–1,483	> 100	(E)- и (Z)-изомеры
BASF, 1988	94	0,868–0,880	1,478–1,485	125	—

Применяется в парфюмерных композициях. Обычная дозировка 2–15%. Ограничений IFRA нет.

2.28. Фарнезол

3,7,11-Триметил-2,6,10-додекатриенол, Farnesol (Arc. 1380, GIV, BASF, Dragoco). $C_{15}H_{26}O$; 222,38

С. А. 4602-84-0

Содержится в лемонграссовом, цитронелловом, пальмарозовом, санталовом, иланг-иланговом и других ЭМ.

Запах — слабый, цветочный (цветов липы) с древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 263°C/1013 гПа; 160°C/13 гПа; 149°C/5,3 гПа; γ_{20} 30,1 дин/см; σ_{20} 18,8 спуаз. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность: по данным Dragoco, — oral LD_{50} 20 мл/кг (крысы), по данным Merck, — 6 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C	Примечание
GIV, 1987	96	0,885–0,889	1,487–1,491	> 100	—
BASF, 1982	97	0,886–0,888	~ 1,489	155	—
Dragoco	96	0,880–0,883	1,487–1,492	—	Смесь 4-х изомеров

Синтетический фарнезол получают изомеризацией неролидола, подобной превращению линалоол — гераниол. Используется в парфюмерных композициях с дозировкой до 30%. IFRA рекомендует использовать в композициях фарнезол с чистотой минимум 96%. Обладает бактериостатическим действием. Вводится как бактериостатик (0,3–0,5%) в дезодоранты и косметические изделия (Brunke E.-J., Klein E., заявка ФРГ 3315058, 26.04.83–31.10.84, РЖХ, 1985, 21Р613П).

2.29. Изофитол

3,7,11,15-тетраметил-1-гексадецен-3-ол, гексагидрогераниллиналоол, Isophytol (Arc. 2614, BASF). $C_{20}H_{40}O$; 296,54

OH

С. А. 505-32-8

Содержится в ЭМ жасмина (Demole E., Lederer E., Bull. soc. chim. Fr. 1958, 1128).

Запах — очень слабый цветочный с травянисто-зеленой нотой, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. ~319°C/1013 гПа; ~140°C/0,13 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый BASF под названием "iso-Phytol R" (1988), содержит минимум 99% изофитола (анализ ГЖХ) и имеет d_{25}^{25} 0,837–0,847; n_D^{20} 1,455–1,458; т. всп. 148°C.

Изофитол является полупродуктом синтеза витамина E. Он производится в больших количествах.

Используется в парфюмерных композициях для придания натуральных оттенков запаха и повышения его стойкости. Ограничений IFRA нет.

2.30. Фитол

3,7,11,15-Тетраметил-2-гексадеценол, Phytol (Arc. 2613, RIFM, BASF), Natural phytol (TAK). $C_{20}H_{40}O$; 296,54

OH

С. А. 150-86-7; 505-32-8

Содержится в ЭМ жасмина (Demole E., Lederer E., Bull. soc. chim. Fr. 1958, 1128).

Запах — очень слабый, цветочно-бальзамический. Вязкая жидкость, т. кип. 202–205°C/12,6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
BASF, 1987	94	0,849–0,853	25/25	1,462–1,466	187
TAK, 1987	85	0,850–0,870	20/20	1,450–1,470	> 140

Может быть получен из полупродуктов синтеза витамина E.

Используется в парфюмерных композициях в качестве фиксатора запаха. Ограничений IFRA нет.

2.31. Гераниллиналоол

3,7,11,15-Тетраметил-1,6,10,14-гексадекатетраен-3-ол, Geranyllinalool (Arc. 1449, BASF). $C_{20}H_{34}O$; 290,49

С. А. 2211-30-5

Найден в ЭМ жасмина (Demole E., Lederer E., Bull. soc. chim. Fr. 1958, 1128).

Запах — слабый цветочный с древесным оттенком, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 250°С/1013 гПа; 115°С/0,007 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый BASF (1987), содержит минимум 96% гераниллиналоола (ГЖХ) и имеет d_{25}^{25} 0,882–0,886; n_D^{20} 1,486–1,489; т. всп. 160°С.

Используется в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

2.32-2.63. АЛЬДЕГИДЫ, АЦЕТАЛИ, КЕТОНЫ

2.32. Цитраль

3,7-Диметил-2,6-октадиеналь, гераниаль—(E)-цитраль, нераль—(Z)-цитраль, Citral (Arc. 649, BBA, RIFM, BASF, H.+R., IFF), Lemarome (GIV), Lemsyn (IFF). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

С. А. 5392-40-5

Содержится в лемонграссовом, кубебовом, цитрусовых и др. ЭМ.

Запах — сильный, лимонный. Жидкость. Смесь (E)- и (Z)-изомеров, соотношение ~ 7 : 3. Т. кип. гераниаля 110–112°С/16 гПа, нераля 102–104°С/16 гПа. Для смеси изомеров т. кип. 228–229°С/1013 гПа; $P_{20}5,0 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 32,7 дин/см; σ_{20} 3,3 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 4,96 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,25 г/кг (кролики)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	Lemarome	96 (ГЖХ)	0,886–0,890	20/4	1,486–1,489	98
BBA, 1990	natural	97 (оксим.)	0,885–0,890	20/20	1,486–1,490	93
BBA, 1990	pure	97,5 (оксим)	~ 0,887	20/20	~ 1,490	> 100
BASF, 1988	extra	99 (ГЖХ)	0,880–0,890	25/25	1,487–1,490	98
BASF, 1988	FCC	97 (ГЖХ)	0,885–0,891	25/25	1,486–1,490	98
BASF, 1988	Neral	90 (ГЖХ) нераля	0,880–0,890	25/25	1,485–1,489	98
H.+R., 1988	—	90 (ГЖХ)	0,884–0,889	25/25	1,486–1,489	93
IFF, 1992	extra	90 (ГЖХ)	0,884–0,892	20/4	1,485–1,490	> 100
IFF, 1992	Lemsyn	85 (ГЖХ)	0,886–0,894	20/4	1,485–1,490	> 100
РФ, 1990	Парфюмерн.	96 (оксим.)	0,888–0,895	20/4	1,485–1,489	103

Методы выделения цитраля из лемонграссового масла вакуум-ректификацией или так называемой сульфитной обработкой, а также способ получения цитраля окислением кориандрового масла, применяемый в РФ, теряют свое прежнее значение из-за дороговизны эфирных масел.

В РФ с 1970 г. эксплуатируется способ получения цитраля, исходя из изопрена, ацетона и ацетилена (В. И. Артемьев и др., авт. свид. 268404, 24.10.66–10.04.70).

HCl; $CH_3 \cdot CO \cdot CH_3$; $CH \equiv CH$; [Ag+]

Разработан и осуществлен в производстве метод прямой перегруппировки дегидролиналоола в цитраль без использования серебряного ка-

тализатора (Pauling H. и др., Helv. chim. acta 1976, **59**, № 4, с. 1233, РЖХ, 1976, 22Ж94; Эрман М. Б. и др. Журн. орг. хим. 1976, **12**, № 5, с. 921, РЖХ 1976, 17Ж80, авт. свид. 882998, 25.12.79-23.11.81).

Из других многочисленных схем синтеза цитраля наиболее приемлемым для производства, вероятно, является способ перегруппировки диренилацеталя преналя (Nissen A. и др., заявка ФРГ 2926562, 30.06.79-22.01.81, РЖХ, 1981, 24Р559П; франц. заявка 2656604, 03.01.90-05.07.91, РЖХ, 1992, 10Н27П):

Цитраль используется во многих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. IFRA рекомендует применять в парфюмерных композициях цитраль совместно с веществами, предотвращающими сенсибилирующее действие, — лимоненом, *альфа*-пиненом и др. Сотни тонн цитраля используются как полупродукты синтеза душистых веществ.

2.33. Цитронеллаль

3,7-Диметил-6-октеналь, Citronellal (Arc. 658, RIFM, BASF, H.+R., Miltitz, GIV, IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C.A. 106-23-0

Содержится в ЭМ цитронеллы, лимонного эвкалипта и др.

Запах — сильный свежий, цитрусовый, ноты мелиссы, цитронеллы. Жидкость, т. кип. 207–208 °C/1013 гПа, 83 °C/13 гПа, P_{20}0,23 гПа; σ_{20}2,43 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2,5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	85 (оксим.)	0,848–0,856	25/25	1,446–1,452	81
BASF, 1987	96 (ГЖХ)	0,840–0,850	25/25	1,440–1,450	77
H.+R., 1988	85 (оксим.)	0,852–0,858	25/25	1,448–1,452	86
Miltitz, 1991	85 (оксим.)	0,854-0,863	20/20	1,448–1,453	86
IFF, 1992	85(ГЖХ)	0,850–0,858	25/25	1,446–1,453	78

Выделение цитронеллаля из эфирных масел чаще всего осуществляют вакуум-ректификацией. Синтетический цитронеллаль получают селективным каталитическим гидрированием цитраля с катализаторами: никелем из формиата или никелем на окиси хрома (Баг А. А. и др., Масло-жировая пром-сть, 1953, № 9, с. 20; Пак А. И., Сокольский Д. В., Селективное гидрирование непредельных оксосоединений, Алма-Ата, "Наука", 1983, с. 47).

Используют главным образом в отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

Большие количества технического цитронеллаля применяют в качестве сырья для синтезов гидроксицитронеллаля и ментола. Для получения (–)-ментола используют (+)-цитронеллаль, выделяемый из цитронеллового масла.

2.34. Тетрагидроцитраль

3,7-Диметилоктаналь, Dihydro citronellal (Arc. 931), Tetrahydro citral (GIV). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

C.A. 5988-91-0

Запах — интенсивный, альдегидный, цитрусовый. Жидкость.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 90% (ГЖХ) тетрагидроцитраля и имеет d_4^{20}0,817–0,827; n_D^{20}1,426–1,429; т. всп. 74 °C.

Может быть получен селективным каталитическим гидрированием цитраля на палладиевых катализаторах. Запатентован также способ гидроформилирования 2,6-диметилгептена (Танамура М. и др., японск. пат. 49-20170, 8.08.70-23.05.74, РЖХ, 1975, 8Р391П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

2.35. Этилцитраль

3,7-Диметил-2,6-нонадиеналь, Ethyl citral (Arc. 1190, RIFM, GIV). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

C.A. 41448-29-7

Запах — сильный, лимонный, менее резкий, чем у цитраля. Жидкость. Смесь (E) -и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит альдегида не менее 85% (оксим.) и имеет d_4^{20}0,883–0,895; n_D^{20}1,483–1,490; т. всп. >100 °С.

Может быть получен окислением этиллиналоола или перегруппировкой дегидроэтиллиналоола.

Используют в небольшом числе парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.36. Гидроксицитронеллаль

7-Гидрокси-3,7-диметилоктаналь, гидроксидигидроцитронеллаль, Hydroxycitronellal (Arc. 1728, RIFM, GIV, IFF, BBA, BASF, H.+R.), Cyclosia base (Firm.), Hydronal (BBA), Laurinal (TAK).

$C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

C.A. 107-75-5

Запах — приятный, цветочный, ноты ландыша и лилии, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 262 °С/1013 гПа, 116 °С/67 гПа, 102–103 °С/3 гПа, 85–87 °С/1,3 гПа; P_{20}3,5·10^{-3} гПа; γ_{20}30,7 дин/см; σ_{20}30,7 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Firm., 1992	Cyclosia base	-	0,935–0,950	20/20	1,453–1,460	>100
GIV, 1984	Synth.	98(ГЖХ)	0,920–0,924	20/4	1,447–1,450	>100
IFF, 1992	extra	95(ГЖХ)	0,918–0,926	20/4	1,447–1,451	>100
IFF, 1992	standart	97(ГЖХ)	0,920–0,925	20/4	1,447–1,451	>100
BBA, 1990	Hydronal	98(ГЖХ)	~0,920	20/20	~1,449	104
BBA, 1990	pure	97(ГЖХ)	~0,920	20/20	~1,449	104
BBA, 1990	"A"	94(ГЖХ)	~0,920	20/20	~1,450	107
BBA, 1990	for soap	75(ГЖХ)	~0,923	20/20	~1,453	>100
BASF,1987	-	98(ГЖХ)	0,918–0,923	25/25	1,447–1,449	113

Продолжение табл.

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
TAK, 1987	Laurinal	98(ГЖХ)	0,917–0,926	25/25	1,445–1,450	123
РФ, 1990	Высший сорт	98 (оксим.)	0,924–0,926	20/4	1,448–1,450	118
H.+R., 1988	-	98(ГЖХ)	0,918–0,922	25/25	1,447–1,450	>100

Появление гидроксицитронеллаля в качестве продажного продукта под названием "Cyclosia base"(1908 г.) было большим успехом химии душистых веществ.

Тогда же был разработан способ синтеза этого продукта из цитронеллаля путем гидратации бисульфитного соединения цитронеллаля в присутствии минеральной кислоты и последующего разложения бисульфитного соединения гидроксицитронеллаля действием карбоната натрия. Позже были предложены другие способы, из которых наибольшее практическое значение могут иметь:

А) Гидратация цитронеллола с последующим дегидрированием образовавшегося диола (Kahn S., пат. США 3940446, 8.07.71–24.02.76, РЖХ, 1976, 21Н46П)

Б) гидроформилирование 2,6-диметил-6-гептен-2-ола (Himmel W. и др., пат. ФРГ 1964962. 24.12.69–13.05.76, РЖХ, 1977, 13Р566П; van Helden R. и др., анг. пат. 1551729, 18.11.75–30.08.79, РЖХ, 1980, 17Н26П)

Гидроксицитронеллаль широко используется в парфюмерных композициях и отдушках. Его дозировка достигала 40%, а объем производства составлял тысячи тонн в год.

Принятая в 1987 г. рекомендация IFRA ограничивает ввод гидроксицитронеллаля в парфюмерные композиции пределом 5%.

2.37. Метоксицитронеллаль

3,7-Диметил-7-метокси-октаналь, метоксидигидроцитронеллаль, Methoxycitronellal (Arc. 1870, RIFM), Melonia (GIV), Methoxycitronellal PQ (BBA). $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C.A. 3613-30-7

Запах — свежей зелени, листьев, лилии. Жидкость, т. кип. 60 °С/0,6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1973	85 (оксим.)	0,892-0,897	25/25	1,439-1,444	—
BBA, 1990	97 (ГЖХ)	~ 0,893	20/20	~ 1,438	98

Один из путей промышленного получения состоит в дегидрировании метоксицитронеллола — побочного продукта синтеза осирола по методу BBA.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.38. Светеналь

3,4,6-Триметил-5-гептеналь, Svetenal (РФ). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

Запах — сильный лимонный. Жидкость, т. кип. 57-58°С/5,3 гПа, 48-49°С/4 гПа; d_4^{20} 0,918.

В соответствии со спецификацией РФ (1990) продажный продукт содержит не менее 86% (оксим.) названного альдегида и имеет n_D^{20} 1,450-1,452.

Получают путем пиролиза вербанола при 450°С и последующей фракционированной вакуум-дистилляции. Пиролиз идет необычно (Поддубная С. С., Черкаев В. Г., Сб. Синтетические продукты из канифоли и скипидара, Горький, Волго-Вятское кн. издательство, 1970, стр. 219):

Может быть использован в парфюмерных композициях и отдушках.

2.39. 2,5,6-Триметил-4-гептеналь

Greenal (ТАК). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 82784-84-7

Запах — сильный, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 77°С/16 гПа.

По данным ТАК (1987), при концентрации 5% не обладает фототоксичностью и не вызывает раздражения (морские свинки).

Продажный продукт ТАК (1987) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 0,835-0,860; n_D^{20} 1,437-1,445; т. всп. 75°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.40. 2-Метиленцитронеллаль

3,7-Диметил-2-метилен-6-октеналь, Bergamal (IFF). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

С. А. 22418-66-2

Запах — сильный, альдегидно-лимонный с нотой бергамота. Жидкость.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	90	0,867-0,875	25/25	1,462-1,468	83
КНР, 1990	88	0,865-0,874	20/20	1,466-1,468	83

Может быть получен взаимодействием цитронеллаля с формальдегидом в присутствии диметиламмонийхлорида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.41. Геранилоксиацетальдегид

6,10-Диметил-3-окса-5,9-ундекадиеналь, Geranoxy acetaldehyde (Arc. 1428, IFF), Geranyl oxyacetaldehyde (RIFM), Peony aldehyde. $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. [redacted]
65405-75-4

Запах — альдегидный, свежий, ноты розы, цикламена. Жидкость, т. кип. 108°С/16 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров, d_4^{20} ~0,902; n_D^{20} ~ 1,471.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит 45-55% альдегида и имеет d_4^{20} ~ 0,970; n_D^{20} ~1,470; т. всп. > 100°С.

Может быть получен взаимодействием натрийалкоголята гераниола с диалкилацеталем хлораля (см., например, Шорыгин П. П., Коршак В. В., Ber. chem. 1935, 68В, № 4, 838) при последующем гидролизе образовавшегося ацеталя геранилоксиацетальдегида.

Используют в сравнительно небольшом числе парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

2.42. Цитронеллилоксиацетальдегид

6,10-Диметил-3-окса-9-ундеценаль, Citronellyl oxyacetaldehyde (Arc. 688, RIFM), Muguet aldehyde 50 (IFF), Mugenal 50 (Dragoco). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 7492-67-3

Запах — мягкий цветочный, ноты ландыша, розы. Жидкость, т. кип. 128-130°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажные продукты обычно представляют собой ~ 50%-ные растворы названного альдегида. Так, продукт IFF (1992) содержит 45-55% цитронеллилоксиацетальдегида в диэтилфталяте, и этот раствор имеет d_4^{20} 0,921-1,020; n_D^{20} 1,450-1,490; т. всп. > 100°С. Mugenal 50 (Dragoco) содержит минимум 50% альдегида и имеет d_4^{20} 0,960-0,970; n_D^{20} 1,454-1,462; т. всп. 80°С.

Получают взаимодействием натрийалкоголята цитронеллола с диметилацеталем хлораля или цитронеллола с KOH, катализатором фазового переноса и диметилацеталем хлораля с последующим превращением полученного ацеталя в альдегид (Sprecker M. A. и др., пат. США 4205186, 16.01.79-27.05.80, РЖХ, 1981, 4Н27П).

Используют в сравнительно небольших количествах в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.43. Диметилвинилгексеналь

2,5-Диметил-2-винил-4-гексеналь, 3,6-диметил-3-формил-1,5-октадиен, Nerolialdehyd (Wacker). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

С. А. 56134-05-5

Содержится в вербеновом и неролиевом ЭМ.

Запах — приятный, с нотой неролиевого масла. Жидкость, т. кип. 76°С/16 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~95% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_4^{20} ~ 0,866; n_D^{20} 1,455-1,460; т. всп. 63°С.

Может быть получен алкилированием тиглинового альдегида пренилхлоридом в присутствии катализатора фазового переноса и щелочи.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.44. Геранилацетальдегид

5,9-Диметил-4,8-декадиеналь, Geraldehyde (IFF). $C_{12}H_{20}O$; 180,29

С. А. 762-26-5

Запах жирный, альдегидный, при разбавлении — цветочные ноты. Жидкость, т. кип. 94-96°С/2,7 гПа, 69°С/0,5 гПа. Смесь (Е)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral LD_{50} > 5 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров геранилацетальдегида и имеет d_4^{20} 0,870-0,874; n_D^{20} 1,468-1,471; т. всп. > 100°С.

Один из способов получения состоит во взаимодействии линалоола с винилалкиловым эфиром, сопровождаемом кляйзеновской перегруппировкой линалилвинилового эфира (Marbet R., Saucy G., Helv. chim. acta 1967, 50, № 7, 2095, РЖХ, 1968, 11Ж142):

Используют в сравнительно небольшом количестве парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

2.45. 2-Геранилпропаналь

2,5,9-Триметил-4,8-декадиеналь, Trimenal (Firm.). $C_{13}H_{22}O$, 194,32

С.А. 32803-39-7

Запах — альдегидно-цветочный с нотами цитрусов, пудры. Жидкость, т. кип. 60-61°С/0,2 гПа, смесь (Е)- и (Z)- изомеров.

Продажный продукт Firm. (1979) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 0,864-0,894; n_D^{20} 1,460-1,466; т. всп. 101°С.

Один из способов получения — взаимодействие линалоола с алкилпропениловым эфиром (Marbet R., Saucy G., пат. США 3493619, 5.09.68-3.02.70, РЖХ, 1971, 5Р540П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.46. 2-Метил-3-геранилпропаналь

2,6,10-Триметил-5,9-ундекадиеналь $C_{14}H_{24}O$; 208,34
Profarnesal (H.+R.), Oncidal (Dragoco).

С. А. 24048-13-3

Запах — альдегидно-цветочный, ноты орхидеи, настурции, фруктов. Жидкость, т. кип. 82-83°С/0,4 гПа, смесь (Е)- и (Z)-изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	0,870-0,876	25/25	1,468-1,474	>100
Dragoco, 1990	0,868-0,878	20/4	1,466-1,476	111

Может быть получен по реакции Дарзана из геранилацетона и этилового эфира монохлоруксусной кислоты (Свищук А. А. и др. Укр. хим. журн. 1962, 28, № 1, 84; Kulesza J., Góra J., Riechstoffe, Aromen, Körperpfl. 1969, 19, № 4, 156).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.47. Эженаль

2-Геранилизомасляный альдегид, 2,2,5,9-тетраметил-4,8-декадиеналь, Egenal (РФ), Geranyl-iso-butyraldehyde (Arc. 1435). $C_{14}H_{24}O$; 208,34

Запах — сильный цветочный с нотой зелени. Жидкость, т. кип. 86-91°С/2,7 гПа, d_4^{20} 0,873, P_{20} $8{,}7\cdot10^{-3}$ гПа; смесь (Е)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral LD_{50} > 5 г/кг (мыши).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 90% названного альдегида и имеет n_D^{20} 1,463–1,467.

Промышленный способ получения состоит во взаимодействии линалоола с изомасляным альдегидом в присутствии кислотного катализатора.

При этом происходит Кляйзеновская перегруппировка первоначально образующегося аллилвинилового эфира:

(С. А. Войткевич и др., авт. свид. 355147, 25.06.1970–16.10.1972, Масложировая пром-сть, 1974, № 11, с. 28).

Используют в парфюмерных композициях в отдушках. Даже небольшие дозы (~ 0,2%) оказывают влияние на запах парфюмерной композиции.

2.48. 2-Метил-3-цитронеллилпропаналь

2,6,10-Триметил-9-ундеценаль, Trimethyl undecylenic aldehyde (Arc. 3014), Adoxal (GIV), Farenal (H.+R.), 2,6,10-Trimethyl-9-undecylen-aldehyde (H.+R.). $C_{14}H_{26}O$; 210,36

C. A. 141-13-9

Запах — цветочно-альдегидный, ноты воска, зелени, розы. Жидкость, т. кип. 133–135°C/12 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (оксим.), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	Adoxal	95	0,848–0,854	1,452–1,457	>100
H +R., 1988	Farenal	95	0,845–0,850	1,451–1,455	100
H.+R., 1988	2,6,10-TMUA	95	0,847–0,851	1,450–1,454	>100

Получают по реакции Дарзана из тетрагидропсевдоионона и этилового эфира хлоруксусной кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.49. Диметилацеталь цитраля

1,1-Диметокси-3,7-диметил-2,6-октадиен, Citral dimethyl acetal (Arc. 652, RIFM, GIV, IFF), Citryl M (H.+R.). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

C. A. 7549-37-3

Запах — лимонный, травянистый, более мягкий, чем у цитраля. Жидкость, т. кип. 140–142°C/20 гПа, 105–106°C/13 гПа, 98–100°C/9 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	93 (оксим.)	0,883–0,888	25/25	1,456–1,463	65
IFF, 1992	90 (ГЖХ)	0,886–0,894	20/4	1,454–1,460	82
Miltitz 1991	90 (ГЖХ)	0,886–0,893	20/20	1,453–1,460	90

Может быть получен взаимодействием цитраля с метанолом в присутствии кислого катализатора.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

В отличие от цитраля не окрашивает туалетное мыло.

2.50. Диэтилацеталь цитраля

1,1-Диэтокси-3,7-диметил-2,6-октадиен, Citral diethyl acetal (Arc. 651, RIFM, Miltitz), Citryl A (H.+R.), Citrathal (Quest). $C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

C. A. 7492-66-2

Запах — цитрусовый, лайма, мягче, чем у цитраля. Жидкость, т. кип. 117–118°C/13 гПа, 109–112°C/9 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп °C
H.+R., 1988	-	0,867–0,873	25/25	1,450–1,454	106
Quest, 1989	-	0,890–0,900	20/20	~1,475	-
Miltitz, 1991	92	0,867–0,875	20/20	1,450–1,457	44

Может быть получен взаимодействием цитраля с этиловым эфиром *орто*-муравьиной кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.51. Этиленгликольацеталь цитраля

2-(2,6-Диметил-1,5-гептадиенил)-1,3-диоксолан, этиленцитраль, Citral ethylene glycol acetal (RIFM), Citracetal (Bedouk.). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 66408-78-4

Запах — сильный, цветочный, лимонный. Жидкость, т. кип. 72–74°C/1,3 гПа, Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, содержащий 98% (ГЖХ) названного ацеталя, имеет n_D^{20} 1,478.

Может быть получен непосредственной ацетализацией цитраля этиленгликолем или переацетализацией диметилацеталя цитраля.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

2.52. Диметилацеталь гидроксицитронеллаля

1,1-Диметокси-3,7-диметил-октан-7-ол, Hydroxycitronellal dimethylacetal (Arc. 1731, RIFM, GIV, BBA, BASF, IFF). $C_{12}H_{26}O_3$; 218.34

С. А. 141-92-4

Запах мягкий цветочный, стойкий. Жидкость, т. кип. 260–276°C/1013 гПа, 131°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98 (ГЖХ)	0,926–0,930	20/4	1,441–1,444	>100
BBA, 1990	95 (ГЖХ)	0,926–0,930	20/20	1,441–1,444	>100
BASF, 1987	98 (ГЖХ)	0,925–0,930	25/25	1,441–1,444	132
РФ, 1990	94 (оксим.)	~ 0,930	20/4	1,441–1,445	-
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,925–0,933	20/4	1,440–1,444	>100

Получают взаимодействием гидроксицитронеллаля с метанолом в присутствии кислотных катализаторов.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

2.53. Этиленэженаль

Этиленгликольацеталь 2,2,5,9-тетраметил-4,8-декадиеналя, 2-(1,1,4,8-тетраметил-3,7-нонадиен-1-ил)-1,3-диоксолан, Ethylene egenal (РФ). $C_{16}H_{28}O_2$; 252,40

Запах — мягкий цветочный с нотой свежей зелени. Жидкость, т. кип. 97–107°C/6,7 гПа; $P_{20}1,7 \cdot 10^{-3}$ гПа; d_4^{20} 0,926. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ,- oral LD_{50} > 16,6 г/кг (крысы, мыши).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 92,5% этиленэженаля и имеет n_D^{20} 1,474–1,475.

Получают взаимодействием эженаля с этиленгликолем в присутствии кислотного катализатора при азеотропной отгонке образующейся воды (Войткевич С. А. и др., авт. свид. 721398, 03.05.78–15.03.80).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

2.54. Диметилацеталь диметилвинилгексеналя

1,1-Диметокси-2,5-диметил-2-винил-4-гексен, Neroliacetal (Wacker). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

OCH3
OCH3

Запах — травянистый с горькой и фруктовой нотами. Жидкость, т. кип. 94°C/16 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~96% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{20}^{20} ~ 0,891; n_D^{20} 1,454–1,458; т. всп. 71°C.

Может быть получен ацетализацией соответствующего альдегида метанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.55. Метилцитронеллилацеталь ацетальдегида

6,10-Диметил-2-метокси-3-окса-9-ундецен, Citronellyl methyl acetal (Arc. 685, IFF). $C_{13}H_{26}O_2$; 214,35

C. A. 68039-24-7

O
OCH3

Запах — свежий, цветочно-цитрусовый, ноты герани, лимона. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит 75–80% (ГЖХ) названного ацеталя, 5–15% цитронеллола, до 7% тетрагидрогеранилметилацеталя и до 2% гераниола и нерола. Он имеет d_4^{20} 0,862–0,870; n_D^{20} 1,438–1,444; т. всп. > 100°C.

Может быть получен переацетализацией диметилацеталя ацетальдегида цитронеллолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.56. Флораль

(3,7-диметил-1,7-октадиенил)-этилацеталь ацетальдегида, Floral (Dragoco). $C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

O O

Запах — сильный цветочный, ноты розы, ландыша, травянистый оттенок. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Dragoco имеет d_4^{20} 0,865–0,875; n_D^{20} 1,440–1,450; т. всп. 74°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.57. Этиллиналилацеталь ацетальдегида

1-Этокси-1-линалилоксиэтан, Acetaldehyde ethyl linalyl acetal (RIFM), Elintaal (Naarden, Quest). $C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

C. A. 40910-49-4

O O

Запах — свежий цветочный, ландыша с травянистой нотой. Жидкость, т. кип. 95°C/6,7 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} > 10 мл/кг (крысы); по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_{20}^{20} 0,872–0,874; n_D^{20} 1,447–1,450, т. всп. 77°C.

Получают взаимодействием линалоола с винилэтиловым эфиром в присутствии кислотных катализаторов (Rijke D., заявка ФРГ 2240206, 11.08.72–22.02.73).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.58. Аленат

Бутиллиналилацеталь ацетальдегида, 1-бутокси-1-линалилокси-этан, Alenate (РФ). $C_{16}H_{30}O_2$; 254,42

Запах — цветочный с нотой ландыша и смолистым оттенком. Жидкость, т. кип. 106–108°С/1,3 гПа; d_4^{20} 0,867.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 95% (оксим.) названного ацеталя и имеет n_D^{20} 1,448–1,450.

Получают взаимодействием линалоола с винилбутиловым эфиром в присутствии кислотного катализатора (Н. Я. Зырянова и др., Масло-жировая пром-сть, 1978, № 4, с. 35).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

2.59. Дигеранилацеталь ацетальдегида

1,1-Дигеранилоксиэтан. $C_{22}H_{38}O_2$ 334,54

Запах — мягкий цветочно-фруктовый с нотой герани. Жидкость. Смесь названного ацеталя с небольшим количеством гераниола.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 90% (оксим.) ацеталя и до 5% гераниола и имеет n_D^{20} 1,470–1,476.

Получают взаимодействием гераниола с ацетальдегидом в присутствии кислотного катализатора.

Используют в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек.

2.60. Изотагетон

2,7-Диметил-3-октен-5-он, Isotagetone 50 (BBA). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

Запах — цветочно-фруктовый, нота календулы. Жидкость, т. кип 58–62°С/2,7 гПа; d_4^{20} 0,826; n_D^{20} 1,446.

Продажный продукт BBA (1990) представляет собой 50%-ный раствор изотагетона в изопропилмиристате. Эта смесь имеет d_4^{20} ~0,843, n_D^{20} ~ 1,441, т. всп. 85°С.

Может быть получен конденсацией метилизобутилкетона с изомасляным альдегидом в присутствии раствора щелочи (И. А. Астахова и др., Масло-жировая пром-сть, 1978, № 9, с. 26). Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.61. Альниталь

Этиленгликолькеталь 2,7-диметил-2-октен-5-она, 2-изобутил-2-пренил-1,3-диоксолан, Alnital (РФ). $C_{12}O_{22}O_2$; 198,31

Запах — древесно-ирисовый. Жидкость, т. кип. 62–65°С/2,7 гПа, d_4^{20} 0,893.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 93% кеталя и имеет n_D^{20} 1,448–1,450, т. всп. 86°С.

Получают взаимодействием изотагетона с этиленгликолем при кипении в растворе толуола (катализ серной кислотой). Одновременно с образованием кеталя происходит перемещение двойной связи в положение 2 (А. В. Гуревич и др., Масло-жировая, пром-сть, 1978, № 10, с. 35).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

2.62. Геранилацетон

6,10-Диметил-5,9-ундекадиен-2-он, Geranyl acetone (Arc. 1432, RIFM, GIV), Geranylaceton R (BASF). $C_{13}H_{22}O$; 194,32

C. A. 3796-70-1

Содержится в африканском лемонграссовом и некоторых других ЭМ.

Запах — свежий цветочно-фруктовый с нотой зелени. Жидкость, т. кип. 124°C/13 гПа, 100°C/3,2 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп. °C
GIV, 1984	95	0,865–0,870	1,465–1,469	>100
BASF, 1987	95	0,868–0,872	1,466–1,469	117

Получают из линалоола двумя промышленными способами:

а) по реакции Кэррола

б) взаимодействием с метилизопропениловым эфиром (Marbet R., Saucy G., Швейц. пат. 416596, 11.07.62–31.01.67, РЖХ, 1968, 5Р482П)

Применяют в парфюмерных композициях и главным образом в отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

В больших количествах используют для синтеза витамина E.

2.62а. Цитронеллилацетон

6,10-Диметил-9-ундецен-2-он, Tetrahydro-pseudoionone (Arc. 2925), Tetrameran (IFF). $C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах цветочно-бальзамический с древесно-розовой нотой. Жидкость, т. кип. 234/1013 гПа; d_{25}^{25} 0,852–0,862; n_D^{20} 1,454–1,460 (GIV).

Продажный продукт IFF (1992) содержит ~90% цитронеллилацетона и имеет d_4^{20} ~ 0,853; n_D^{20} ~ 1,452; т. всп. >93°C.

2.63. Баккартол

Смесь, содержащая цитронеллилиденацетон, 6,10-диметил-3,9-ундекадиен-2-он, Baccartol (RIFM, GIV), Givco 141 (GIV). $C_{13}H_{22}O$; 194,32

Один из компонентов

Запах — цветочный, ноты розы, герани. Жидкость. Смесь компонентов.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) имеет d_4^{20} 0,925–0,935; n_D^{20} 1,475–1,478; т. всп. 61–100°C.

Получают взаимодействием цитронеллового масла с ацетоном в присутствии щелочи. При этом цитронеллаль конденсируется с ацетоном.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

2.64–2.102. СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ

2.64. Геранилформиат

2,7-Диметил-2,6-октадиенил-формиат, Geranyl formate (Arc. 1446, RIFM, GIV, IFF, BBA), Nerger formate (IFF). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

C. A. 105-86-2

Содержится в хмеле, гераниевом и других ЭМ.

Запах — свежий, фруктово-травянистый, ноты розы, герани. Жидкость, т. кип. 113–114°C/20 гПа, 88°C/4 гПа; γ_{20} 31,7 дин/см; σ_{20} 2,15 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т.всп., °C
GIV, 1961	95 (омыл.)	0,906–0,914	25/25	1,458–1,464	85
BBA, 1990	92 (ГЖХ)	0,920–0,925	20/20	1,464–1,467	96
H.+R., 1988	95 (омыл.)	0,918–0,921	25/25	1,462–1,465	>100
IFF, 1992	90* (ГЖХ)	0,909–0,917	25/25	1,456–1,462	85

* В том числе до 45% цитронеллилформиата.

Вырабатываемый IFF (1992) Nerger formate содержит минимум 90% (ГЖХ) формиатов гераниола и нерола в соотношении 6:4. Он обладает лаймово-лимонным запахом с нотой бергамота и имеет d_4^{20} 0,917–0,925, n_D^{20} 1,460–1,465, т. всп. 91°С.

Геранилформиат получают взаимодействием гераниола и муравьиной кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%, а также в пищевых, ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.65. Геранилацетат

3,7-Диметил-2,6-октадиенилацетат, Geranyl acetate (Arc. 1430, RIFM, GIV, IFF, BBA), Geranylacetat (Miltitz), Meraneine (BBA). $C_{12}H_{20}O_2$ 196,29

C. A. 105-87-3

Содержится в гераниевом, цитронелловом и многих других ЭМ.

Запах — сильный, фруктово-цветочный, ноты, розы, лаванды. Жидкость, т. кип. 130–132°С/29 гПа, 90–91°С/6,7 гПа, γ_{20} 31,5 дин/см; σ_{20} 3,27 спуаз. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974) — oral LD_{50} 6,3 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание %, состав	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп. °С
GIV, 1961	Pure	92 (омыл.)	0,900–0,910	25/25	1,457–1,462	109
IFF, 1992	-	90 (ГЖХ) ГА 50-80, ЦА 15-40	0,902–0,910	20/4	1,454-1,460	>100
BBA, 1990	Meraneine	98 (ГЖХ)	~ 0,911	20/20	~1,462	102
BBA, 1990	Pure	95 (ГЖХ)	~0,910	20/20	~1,462	102
BBA, 1990	A	98 (омыл.) ГА-62, НА-33	~0,910	20/20	~ 1,461	104
Miltitz, 1991	-	95 (омыл.)	0,904–0,916	20/20	1,454–1,456	104
РФ, 1990	-	94 (омыл.)	0,911–0,918	20/4	1,459–1,463	-

Получают этерификацией уксусной кислоты гераниолом. Запатентован способ получения изомеризацией линалилацетата (Meyer K., швейц пат. 605592, 3.04.74–29.09.78, РЖХ, 1979, 5Р592П).

В больших количествах используют в парфюмерных композициях и отдушках. Дозировка — до 25%. Ограничений IFRA нет.

2.66. Геранилпропионат

3,7-Диметил-2,6-октадиенил-пропионат, Geranyl propionate (Arc. 1456, RIFM, GIV, IFF, BBA), Geranylpropionat (Miltitz). $C_{13}H_{33}O_2$; 210,32

C. A. 105-90-8

Запах — свежий, фруктовый, нота розы. Жидкость, т. кип. 253°С/1013 гПа, 128°С/6,7 гПа, 101°С/4 гПа; γ_{20} 30,6 дин/см; σ_{20} 2,6 спуаз. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	92 (омыл.)	0,896–0,909	25/25	1,457–1,462	99
IFF, 1992	90 (ГЖХ)	0,879–0,905	20/4	1,455–1,462	>100
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,904–0,908	20/20	1,461–1,464	>100
Miltitz, 1991	97 (омыл.)	0,900–0,910	20/20	1,456–1,464	>100

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит не менее 50% геранилпропионата, до 10% нерилпропионата и до 45% цитронеллилпропионата. Может быть получен этерификацией пропионовой кислоты гераниолом при азеотропной отгонке образующейся воды с толуолом

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.67. Геранилбутират

3,7-Диметил-2,6-октадиенилбутират, $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34
Geranyl butyrate (Arc. 1436, RIFM, GIV, IFF, BBA).

С. А. 106-29-6

Содержится с цитронелловом, лавандовом и др. ЭМ.

Запах — фруктовый, ноты розы, герани. Жидкость, т. кип. 151-153°C/24 гПа, 142-143°C/17 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 10,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	92 (омыл.)	0,891-0,896	25/25	1,456-1,462	93
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,891-0,899	20/4	1,455-1,460	>100
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,897-0,901	20/20	1,459-1,461	110
РФ, 1990	94 (омыл.)	~ 0,895	20/4	1,456-1,458	-

Примечание. Продукт IFF (1992) содержит 50-80% геранилбутирата, до 10% нерилбутирата и 20-40% цитронеллилбутирата.

Получают этерификаций масляной кислоты гераниолом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.68. Геранилизобутират

3,7-Диметил-2,6-октадиенил-изобутират, $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34
Geranyl isobutyrate (Arc. 1437, RIFM, IFF), Geranylisobutyrat (Miltitz).

С. А. 2345-26-8

Содержится в гераниевом и других ЭМ.

Запах — фруктово-цветочный с нотой розы, более тонкий, чем у геранилбутирата. Жидкость, т. кип. 135-137°C/17 гПа, 93-95°C/2 гПа Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т всп., °C
IFF, 1992	90* (ГЖХ)	0,885 0,893	20/4	1,451-1,456	>100
Miltitz, 1992	98 (ГЖХ)	0,894-0,901	20/20	1,456-1,461	102
РФ, 1980	92 (омыл.)	0,885-0,897	20/4	1,448-1,458	-

* В том числе 15-35% цитронеллилизобутирата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.69. Геранилизовалерат

3,7-Диметил-2,6-октадиенилизовалерат, $C_{15}H_{26}O_2$; 238,38
Geranyl isovalerate (Arc. 1461, RIFM).

С. А. 109-20-6

Содержится в ЭМ лимонного эвкалипта.

Запах — сильный, фруктовый, ноты яблока, розы. Жидкость, т. кип. 279°C/1013 гПа, 135-138°C/9,3 гПа; γ_{20} 28,6 дин/см; σ_{20} 3,6 спуаз. Смесь (E)- и (Z)-изомеров: (E)-изомер — геранилизовалерат — d_{15}^{15} 0,896, n_D^{20} 1,456, (Z)-изомер — нерилизовалерат — d_{15}^{15} 0,890, n_D^{20} 1,453.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Получают этерификацией изовалериановой кислоты гераниолом при азеотропной отгонке образующейся воды. Парфюмерное качество получаемого продукта зависит от изомерного состава гераниола и изовалериановой кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.70. Геранилтиглат

Гераниоловый эфир тиглиновой кислоты, гераннл-2-метил-(E)-2-бутеноат, Geranyl tiglate (Arc. 1459, RIFM), Geranyltiglat (Wacker).

$C_{15}H_{24}O_2$; 236,36

С. А. 7785-33-3

Содержится в геранневом ЭМ.

Запах — подобный запаху герани с фруктовой нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 149-151°С/9,3 гПа, 105°С/0,2 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~96% (ГЖХ) геранилтиглата и имеет d_{20}^{20} ~0,923; n_D^{20} 1,477-1,489; т. всп. >100°С.

Может быть получен переэтерификацией метилтиглата гераниолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

2.71. Геранилбензоат

3,7-Диметил-2,6-октадиенилбензоат, Geranyl benzoate (Arc. 1434, RIFM, GIV).

$C_{17}H_{22}O_2$; 258,37

С. А. 94-48-4

Содержится в иланг-иланговом ЭМ.

Запах — слабый с нотой иланг-иланга, стойкий. Жидкость, т. кип. 194-195°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт должен содержать не менее 95% (омыл.) сложного эфира и иметь d_{25}^{25} 0,978-0,984; n_D^{20} 1,513-1,518; т.всп. >100°С.

Может быть получен переэтерификацией метилбензоата гераниолом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.72. Геранилфенилацетат

Гераниоловый эфир фенилуксусной кислоты, 3,7-диметил-2,6-октадиенилфенилацетат, Geranyl phenylacetate (Arc. 1454, RIFM, GIV).

$C_{18}H_{24}O_2$; 272,39

С. А. 102-22-7

Запах — слабый, цветочно-медовый, очень стойкий. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт должен содержать не менее 97% (омыл.) сложного эфира и иметь d_{25}^{25} 0,971-0,978; n_D^{20} 1,507-1,511; т. всп. 99°С.

Используется в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.73. Нерилацетат

3,7-Диметил-(Z)-2,6-октадиенилацетат, Neryl acetate (Arc. 2322, RIFM, GIV, BBA, IFF).

$C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 141-12-8

Содержится в ЭМ лимона, горького померанца, мускатного шалфея и др.

Запах — цветочный приятный с цитрусовой нотой и оттенком запаха розы. Жидкость, т. кип. 134°С/33 гПа, 93-94°С/4 гПа. Обычно содержит некоторое количество геранилацетата и примеси других ацетатов терпеновых спиртов.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание ацетатов, %	Состав, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	95 (омыл.)	—	0,907–0,913	25/25	1,460–1,465	>100
BBA, 1990	97 (ГЖХ)	НА≥92	~0,911	20/20	~1,461	>100
IFF, 1992 (Neryl acetate A)	97 (ГЖХ)	НА-55-65 ГА-35-45	0,909–0,915	25/25	1,459–1,462	>100
IFF, 1992 (Neryl acetate)	95 (ГЖХ)	НА-30-50 ГА-50-70	0,908–0,916	25/25	1,458–1,463	>100

Может быть получен этерификацией уксусной кислоты неролом при азеотропной отгонке образующейся воды. Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.74. Нерилпропионат

3,7-Диметил-(Z)-2,6-октадиенилпропионат, Neryl propionate (Arc. 2329, RIFM). $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

С. А. 105-91-9

Запах — сладкий, фруктовый со свежей цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 233°С/1013 гПа, 114–118°С/6,7 гПа; d_{15}^{15} ~0,904; n_D^{20} ~1,455. Обычно содержит некоторое количество геранилпропионата.

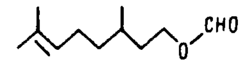
Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Может быть получен этерификацией пропионовой кислоты неролом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.75. Цитронеллилформиат

3,7-Диметил-6-октенилформиат, Citronellyl formate (Arc. 683, RIFM, GIV, BBA, IFF, H.+R.). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28



С. А. 105-85-1

Содержится в гераниевом и других ЭМ.

Запах — сильный, фруктовый, ноты розы, герани, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 120°С/20 гПа, 97–98°С/15 гПа; γ_{20} 30,6 дин/см; σ_{20} 2,7 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 8,4 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	96 (омыл.)	0,887–0,900	25/25	1,443–1,448	93
BBA, 1990	95 (ГЖХ)	0,897–0,900	20/20	1,444–1,447	104
H.+R., 1988	95 (омыл.)	0,895–0,899	25/25	1,442–1,446	>100
РФ, 1990	96 (омыл.)	0,894–0,898	20/4	1,441–1,445	—
IFF, 1992	80 (ГЖХ)	0,891–0,899	20/4	1,441–1,446	91

Примечание. Продукт, вырабатываемый IFF, содержит 60–80% цитронеллилформиата, до 10% суммы геранил-нерилформиатов и до 25% тетрагидрогеранилформиата.

Получают взаимодействием цитронеллола с муравьиной кислотой.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.76. Цитронеллилацетат

3,7-Диметил-6-октенилацетат, Citronellyl acetate (Arc. 671, RIFM, GIV, IFF, BBA, H.+R.), Citronellylacetat (Miltitz), Cephreine (BBA) — устаревшее назв. $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 150-84-5

Содержится в виде (+)-формы в цитронелловом ЭМ, масле лимонного эвкалипта и др.

Запах — свежий цветочно-фруктовый с нотами розы, герани. Жидкость, т. кип. 172–173°С/45 кПа, 119–121°С/20 гПа, 107–

108°C/14,6 гПа; γ_{20} 28,7 дин/см; σ_{20} 3,4 спуаз. Для (+)-формы $[\alpha]_D$ +2,5°.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 6,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	92 (омыл.)	0,883–0,888	25/25	1,440–1,447	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,886–0,890	25/25	1,442–1,445	>100
IFF, 1992	90 (ГЖХ)	0,884–0,892	20/4	1,440–1,446	>100
BBA, 1990	94 (ГЖХ)	~0,890	20/20	~1,444	102
Miltitz, 1991	98 (омыл.)	0,883–0,895	20/20	1,442–1,447	>100

Примечание. Продукт, вырабатываемый IFF, содержит минимум 60% цитронеллилацетата, до 20% геранил- и нерилацетатов и до 25% тетрагидрогеранилацетата.

Получают ацетилированием цитронеллола, выделенного из цитронеллового масла, или синтетического (±)-цитронеллола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.77. Родинилацетат

Основной компонент — (–)-3,7-диметил-6-октенилацетат, Rhodinyl acetate (Arc. 2798, RIFM, GIV, IFF).

$C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 141-11-7; 150-84-5

Запах — яркий цветочный, свежей розы. Жидкость. Продукт ацетилирования фракции (–)-цитронеллола, выделенной из гераниевого масла. Смесь ацетатов (–)-цитронеллола, гераниола и нерола.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание %	Состав, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	87 (омыл.)	—	0,894–0,905	25/25	1,452–1,458	>100
IFF, 1992	85 (ГЖХ)	ЦА 45–65 ГА 20–40 НА <10	0,895–0,905	20/4	1,451–1,457	96

Получают ацетилированием роднилола, выделяемого из гераниевого масла.

Используют в дорогих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

2.78. Цитронеллилпропионат

3,7-Диметил-6-октенилпропионат, Citronellyl propionate (Arc. 691, RIFM, GIV, IFF, BBA), Citronellylpropionat (Miltitz).

$C_{13}H_{24}O_2$; 212,33

С. А. 141-14-0

Запах — фруктово-цветочный с нотой розы. Жидкость, т. кип. 116–118°C/7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	90 (омыл.)	0,877–0,883	25/25	1,443–1,449	>100
BBA, 1990	95 (ГЖХ)	0,885–0,887	20/20	1,444–1,446	>100
Miltitz, 1991	95 (ГЖХ)	0,885–0,895	20/20	1,443–1,447	>100
IFF, 1992	90 (ГЖХ)	0,878–0,886	20/4	1,439–1,444	>100

Примечание. Продукт, вырабатываемый IFF, содержит 60–80% (ГЖХ) цитронеллилпропионата, до 10% геранил- и нерилпропионатов и до 25% тетрагидрогеранилпропионата.

Получают этерификацией пропионовой кислоты цитронеллолом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.79. Цитронеллилбутират

3,7-Диметил-6-октенилбутират, Citronellyl butyrate (Arc. 674, GIV, BBA), Citronellyl n-butyrate (RIFM), Citronellylbutyrat (Miltitz).

$C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

C. A. 141-16-2

Содержится в цейлонском цитронелловом ЭМ.

Запах сладкий фруктовый, нота розы. Жидкость, т. кип. 134–135°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	90 (омыл.)	0,873–0,883	25/25	1,444–1,448	>100
BBA, 1990	95 (ГЖХ)	0,880–0,883	20/20	1,445–1,448	>100
Miltitz, 1991	95 (ГЖХ)	0,878–0,888	20/20	1,443–1,448	>100

Получают этерификацией масляной кислоты цитронеллолом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.80. Цитронеллилизобутират

3,7-Диметил-6-октенилизобутират, Citronellyl isobutyrate (Arc. 675, RIFM, GIV, IFF).

$C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

C. A. 97-89-2

Запах — фруктовый с нотами яблока, розы, герани. Жидкость, т. кип. 131–132°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Цитронеллилизобутират, вырабатываемый IFF (1992), содержит не менее 90% (ГЖХ) изобутиратов терпеновых спиртов, в том числе 65–85% цитронеллилизобутирата, до 14% геранил- и нерилизобутиратов и до 16% тетрагидрогеранилизобутирата. Он имеет d_4^{20} 0,879–0,882; n_D^{20} 1,440–1,446; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией изомасляной кислоты соответствующим сортом цитронеллола.

Родинилизобутират (C. A. 138-23-8) традиционно получают из смеси (–)-цитронеллола, гераниола и нерола, выделяемой из гераниевого масла. Этот продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит 45–65% цитронеллилизобутирата, 20–40% геранилизобутирата и до 10% нерилизобутирата. Он имеет d_4^{20} 0,881–0,891; n_D^{20} 1,448–1,453; т. всп. >100°С.

Оба изобутирата используются в довольно небольшом ассортименте парфюмерных композиций (ввод до 10%) и пищевых ароматических эссенций. Ограничений IFRA нет.

2.81. Цитронеллилтиглат

Цитронеллоловый эфир тиглиновой кислоты, 5-окса-3,8,12-триметил-2,11-тридекадиен-4-он, Citronellyl tiglate (Arc. 693), Citronellyltiglat (Wacker).

$C_{15}H_{26}O_2$; 238,38

C. A. 24717-85-9

Содержится в гераниевом масле.

Запах — мягкий цветочно-бальзамический, ноты розы и травы, стойкий. Жидкость, т. кип. 144–145°С/9 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~96% (ГЖХ) цитронеллилтиглата и имеет d_{20}^{20} ~0,903; n_D^{20} 1,463–1,467; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией тиглиновой кислоты цитронеллолом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.82. Цитронеллилэтилоксалат

Этилцитронеллилоксалат, Ethyl citronellyl oxalate (Arc. 1193, IFF). $C_{14}H_{24}O_4$; 256,34

С. А. 60788-25-2

Запах — цветочно-мускусный. Жидкость, т. кип. 107–108°С/1,3 гПа.

Промышленный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы названного сложного эфира и его дигидропроизводного. Продукт имеет d_4^{20} 0,970–0,978; n_D^{20} 1,446–1,450; т. всп. >100°С.

Получают переэтерификацией диэтилоксалата цитронеллолом (А. А. Крон и др., Масло-жиров. пром. 1985, № 10, 28). Парфюмерное качество продукта зависит от степени чистоты цитронеллола. При наличии в нем гераниола, нерола или тетрагидрогераниола приятная мускусная нота запаха заглушается.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.83. Тетрагидрогеранилацетат

3,7-Диметилоктилацетат, дигидроцитронеллилацетат, Dimethyl octanyl acetate (Arc. 1033, IFF), 3,7-Dimethyloctanyl acetate (RIFM), Tetrahydrogeranyl acetate (BBA). $C_{12}H_{24}H_2$; 200,32

С. А. 20780-49-8

Запах — цветочно-фруктовый с нотами розы, воска. Жидкость, т. кип. 231°С/1013 гПа, 76–77°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
BBA, 1990	95	0,863–0,866	20/20	1,425–1,428	95
РФ, 1992	90	~0,864	20/4	1,426–1,430	—
IFF, 1992	90	0,861–0,869	25/25	1,425–1,430	>100

Получают этерификацией уксусной кислоты тетрагидрогераниолом при азеотропной отгонке воды, образующейся при этерификации.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Более устойчив к действию надкислот чем соответствующие ненасыщенные соединения. Ограничений IFRA нет.

2.84. Линалилформиат

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-ил-формиат, Linalyl formate (Arc. 1815, RIFM, GIV). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

С. А. 115-99-1

Содержится в ЭМ мускатного шалфея, лавандина и др.

Запах — фруктовый, ноты бергамота, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 100–103°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 95% (омыл.) формиатов, в том числе 80% (ГЖХ) линалилформиата, и имеет d_4^{20} 0,914–0,919; n_D^{20} 1,453–1,457; т. всп. 73°С.

Может быть получен взаимодействием линалоола с муравьиной кислотой или селективным каталитическим гидрированием дегидролиналилформиата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.85. Линалилацетат

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илацетат, $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29
Linalyl acetate (Arc. 1806, GIV, H.+R., BASF, BBA), Phanteine (BBA)

C. A. 115-95-7

Содержится в ЭМ лаванды, лавандина, мускатного шалфея, бергамота, лиметты и многих других.

Запах — приятный цветочно-фруктовый, бергамота, нота лаванды. Жидкость, т. кип. 115-116°C/33 гПа, 98-100°C/13 гПа, 88-89°C/6 гПа; P_{20} 9,0·10^{-2} гПа; γ_{20}28,7 дин/см; σ_{20} 3,0 спуаз.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт.	Минимальное содержание %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	Synth.	96 (ГЖХ)	0,898-0,903	20/4	1,449-1,452	85
H.+R., 1988	—	94 (ГЖХ)	0,898-0,902	25/25	1,449-1,453	85
BASF, 1987	—	96 (ГЖХ)	0,895-0,914	25/25	1,449-1,452	87
BBA, 1990	Bois de rose	97 (ГЖХ)	0,903-0,907	20/20	1,450-1,454	77
BBA, 1990	Pure	96 (ГЖХ)	0,898-0,903	20/20	1,449-1,452	88
BBA, 1990	UC	95 (ГЖХ)	~0,901	20/20	~1,451	85
РФ, 1990	В. сорт	97 (омыл.) 94 (ГЖХ)	~0,900	20/4	1,451-1,453	95

Промышленное получение линалилацетата ацетилированием линалоола требует специальных приемов из-за склонности линалоола к дегидратации с образованием терпеновых углеводородов, а в процессе ацетилирования — к получению терпинилацетата, плинилацетатов и других соединений.

В РФ используется способ ацетилирования линалоола уксусным ангидридом при непрерывной отгонке образующейся уксусной кислоты в виде азеотропа с толуолом. Эта азеотропная смесь имеет т. кип. 105°C, что позволяет отделить ее от уксусного ангидрида на ректификационной колонне (Дучинская Ю. И., Чебышев А. Г. Производство синтетических душистых веществ, 1959, с. 59). При получении синтетического линалилацетата из дегидролиналоола обычно предпочитают сначала вести ацетилирование дегидролиналоола, а затем селективное каталитическое гидрирование.

Линалилацетат относится к наиболее распространенным ДВ. Его используют в парфюмерных композициях, отдушках различного назначения и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.86. Линалилпропионат

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илпропионат, $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32
Linalyl propionate (Arc. 1821, RIFM, GIV, BBA).

C. A. 144-39-8

Содержится в ЭМ лаванды и мускатного шалфея.

Запах — фруктово-цветочный с нотами бергамота, ландыша. Жидкость, т. кип. 212°C/1013 гПа, 115-119°C/21 гПа, 108-111°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (омыл.) 90 (ГЖХ)	0,893-0,897	1,449-1,453	92
BBA, 1987	98 (омыл.)	~0,895	~1,451	87

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.87. Линалилбутират

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илбутират, $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34
Linalyl butyrate (Arc. 1809, RIFM, GIV).

С. А. 78-36-4

Содержится в лавандовом, лавандиновом и других ЭМ.

Запах — фруктовый с цитрусо-цветочными нотами. Жидкость, т. кип. 112–114°С/9 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 95% (омыл.) сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,888–0,893; n_D^{20} 1,449–1,453; т. всп. 102°С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.88. Линалилизобутират

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илизобутират, $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34
Linalyl isobutyrate (Arc. 1810, RIFM, GIV, BBA).

С. А. 78-35-3

Содержится в лавандовом и других ЭМ.

Запах — свежий фруктовый с нотой лаванды. Жидкость, т. кип. 105–108 °С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

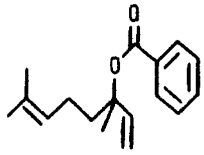
Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %		d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
	омыл.	ГЖХ			
GIV, 1994	95	92	0,882–0,888	1,446–1,451	98
BBA, 1987	—	~98	~0,885	~1,446	99

Используют в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.89. Линалилбензоат

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илбензоат, $C_{17}H_{22}O_2$; 258,37
Linalyl benzoate (Arc. 1808, RIFM, GIV).



С. А. 126-64-7

Содержится в ЭМ иланг-иланга, туберозы.

Запах — цветочный с нотой туберозы. Жидкость, т. кип. 170–173 °С/33 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 95% (омыл.) сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,979–0,984; n_D^{20} 1,509–1,513; т. всп. 98 °С.

Может быть получен селективным каталитическим гидрированием дегидролиналилбензоата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 8%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.90. Линалилциннамат

3,7-Диметил-1,6-октадиен-3-илциннамат, $C_{19}H_{24}O_2$; 284,40
Linalyl cinnamate (Arc. 1813, RIFM, GIV).

С. А. 78-37-5

Запах — фруктово-цветочный, бальзамический, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 353 °С, σ_{20} 85,7 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 10 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 95% (омыл.) сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,986–0,992; n_D^{20} 1,540–1,544; т. всп. >100 °С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях.

2.91. Этиллиналилацетат

3,7-Диметил-1,6-нонадиен-3-илацетат, $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32
Ethyl linalyl acetate (Arc. 1280, RIFM, GIV).

C. A. 61931-80-4

Запах — свежий, бергамотно-лавандовый. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 94% (ГЖХ) суммы изомерных ацетатов и имеет d_4^{20} 0,898–0,903; n_D^{20} 1,450–1,454; т. всп. 83 °C.

Может быть получен селективным гидрированием дегидроэтиллиналилацетата с катализатором Линдлара.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.92. Тетрагидролиналилацетат

3,7-Диметилоктан-3-илацетат, Tetrahydro linalylacetate (Arc. 2914, GIV), Tetrahydrolinalylacetat (BASF). $C_{12}H_{24}O_2$, 200,32

C. A. 20780-48-7

Запах — цветочно-фруктовый, слегка травянистый. Жидкость, т. кип. 198 °C/1013 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	0,862–0,866	1,423–1,427	75
BASF, 1988	98	0,862–0,864	1,423–1,425	82
РФ, 1989	95	0,858–0,868	1,423–1,426	—

Получают каталитическим гидрированием дегидролиналилацетата или ацетилированием тетрагидролиналоола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.93. Мирценилацетат

2-Метил-6-метилен-7-октен-2-илацетат, $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29
Myrcenyl acetate (Arc. 2285, RIFM, IFF), Bergamyl acetate (GIV), Neobergamate (Quest).

C. A. 1118-39-4

Запах — сильный, цветочно-травянистый с нотой бергамота. Жидкость, т. кип. 111–112 °C/13 гПа, 96 °C/6,7 гПа, 53 °C/0,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 6,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	Myrcenyl acetate	90 (ГЖХ)	0,905–0,913	20/4	1,456–1,461	82
GIV, 1987	Bergamyl acetate	95 (омыл.)	0,929-0,938	20/4	1,460-1,465	96
Quest, 1989	Neobergamate	—	0,928-0,937	20/20	1,461-1,465	99
Quest, 1989	Neobergamate fort	—	0,934-0,942	20/20	1,474-1,478	104

Может быть получен взаимодействием мирценола с уксусным ангидридом при катализе фосфорной кислотой. При взаимодействии мирцена с уксусной кислотой в присутствии серной кислоты наряду с мирценилацетатом образуется терпинилацетат и другие ацетаты.

Используют в парфюмерных композициях и, главным образом, в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.94. Дигидромирценилацетат

2,6-Диметил-7-октен-2-илацетат, Dihydro myrcenyl acetate (Arc. 965, IFF), Dihydromyrcenyl acetate (RIFM, BBA, Quest). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

C. A. 53767-93-4

Запах — цветочно-цитрусовый, ноты бергамота, лайма, лаванды. Жидкость, т. кип. 82 °C/8 гПа; P_{20} 0,12 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} >10 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	96	0,870–0,878	20/4	1,429–1,434	82
Quest, 1989	97	0,872–0,879	20/20	1,429–1,434	79
BBA, 1990	~99	~0,872	20/20	~1,433	81

Получают ацетилированием дигидромирценола (С. С. Поддубная и др., Масло-жировая пром-сть, 1978, № 7, с. 30).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.95. Оцименилацетат

2,6-Диметил-5,7-октадиен-2-илацетат, *cis*-Ocimenyl acetate (Arc. 2390), Ocimenyl acetate (RIFM, IFF). $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

C. A. 72214-23-4

Запах — цветочно-цитрусовый с нотами бергамота, лаванды, ананаса. Жидкость. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров оцименилацетата (включая до 10% мирценилацетата) при соотношении (E):(Z)=2:1. Он имеет d_4^{20} 0,908–0,915; n_D^{20} 1,465–1,470; т. всп. 92 °C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.96. Тетрагидромюгилацетат

Смесь тетрагидромирценилацетата и тетрагидролиналилацетата, Tetrahydro mugyl acetate (Arc. 2919, RIFM, IFF). $C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

I

II

C. A. 20780-48-7

Запах — свежий, цитрусово-травянистый. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 92% (ГЖХ) суммы изомерных ацетатов и имеет d_4^{20} 0,864–0,872; n_D^{20} 1,424–1,428; т. всп. 80 °C.

Содержание I: 25–45 %, II: 50–70 %.

Получают ацетилированием "тетрагидромюгола" — продукта исчерпывающего гидрирования мюгола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

2.97. Эленилацетат

3,7-Диметил-6-октен-2-илацетат, Elgenyl acetate (GIV), Elenyl acetate (РФ). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

Запах — приятный, цветочный с нотой бергамота. Жидкость, т. кип. 74 °C/4 гПа, d_4^{20} 0,890.

Товарный продукт в соответствии со спецификацией РФ (1972) должен содержать не менее 98% (омыл.) сложного эфира и иметь n_D^{20} 1,440–1,445, т. всп. 85 °C.

Получают ацетилированием эленола уксусным ангидридом (В. Н. Красева, В. Г. Черкаев, Труды ВНИИСНДВ, вып. VII, 1965, с. 11).

Может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

2.98. Лавандулилацетат

2.6-Диметил-3-ацетоксиметил-1,5-гептадиен, Lavandulyl acetate (Arc. 1975, RIFM, IFF). $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

C. A. 25905-14-0

Содержится в ЭМ лаванды.

Запах — цветочно-травянистый с нотой лаванды. Жидкость, т. кип. 106–107 °C/17 гПа, d_4^{20} ~0,910, n_D^{20} ~1,456, т. всп. 91 °C.

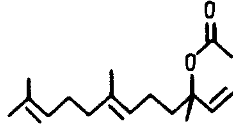
Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В прежние годы вырабатывался IFF путем ацетилирования лавандулола.

Может быть использован в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.99. Неролидилацетат

3,7,11-Триметил-1,6, 10-додекатриен-3-илацетат, Nerolidyl acetate (Arc. 2317, RIFM, GIV). $C_{17}H_{28}O_2$; 264,41



C. A. 2306-78-7

Содержится в неролиевом и мускатно-шалфейном ЭМ.

Запах — мягкий древесный с оттенками запаха зелени, фруктов. Жидкость, т. кип. 136–138 °C/3,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 95% (омыл.) сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,900–0,904; n_D^{20} 1,467–1,471; т. всп. > 100 °C.

Может быть получен ацетилированием неролидола или селективным каталитическим гидрированием дегидронеролидилацетата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.100. Дигидропсевдононилацетат

6,10-Диметил-5,9-ундекадиен-2-илацетат, Tangerinol (Roure). $C_{15}H_{26}O_2$; 238,38

Запах — сильный, свежий с цитрусовой и фруктовой нотами и жирным оттенком. Жидкость. Смесь (E)- (Z)-изомеров.

Острая токсичность, по данным Roure, — oral LD_{50} >8 г/кг (крысы).

Продажный продукт Roure (1991) содержит не менее 99% сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 0,891–0,895; n_D^{20} 1,456–1,460; т. всп. 131 °C.

Получают ацетилированием продукта восстановления псевдононона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.101. Фитилацетат

3,7,11,15-Тетраметил-2-гексадеценилацетат, Phytyl acetate (Arc. 2615, BASF). $C_{22}H_{42}O_2$; 338,58

Содержится в ЭМ крупноцветного жасмина.

Запах — слабый цветочный с легкой фруктовой нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 150 °С/2 гПа.

Продажный продукт BASF (1988) содержит не менее 95% (ГЖХ) фитилацетата и имеет d_{25}^{25} 0,869–0,871; n_D^{20} 1,455–1,457; т. всп. 150 °С.

Получают ацетилированием фитола.

Используют в парфюмериых композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.102. Метилгераниат

Метиловый эфир гераниевой кислоты, метил-3,7-диметил-2,6-октадиеноат, Methyl geranate (Firm.). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

С. А. 1189-09-90

Содержится в хмеле, в ЭМ некоторых сортов эвкалипта.

Запах — цветочно-травянистый с нотами герани, цитрусов. Жидкость, т. кип. 122–125 °С/23 гПа, 117 °С/19 гПа, 72 °С/0,4 гПа. Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Продажный продукт Firm. (1981, 1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров метилгераниата и имеет d_{20}^{20} 0,922–0,929; n_D^{20} 1,468–1,473; т. всп. 99 °С.

Получают этерификацией гераниевой кислоты метанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

2.103–2.117. ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ, ОКСИДЫ, НИТРИЛЫ

2.103. Геранилэтиловый эфир

3,7-Диметил-1-этокси-2,6-октадиен, этиловый эфир гераниола, Ethyl geranyl ether (Arc. 1249), Geranyl ethyl ether (RIFM, IFF), Novorosan (Dragoco). $C_{12}H_{22}O$; 182,31

С. А. 22882-89-9

Запах — цветочный, ноты розы, герани с фруктовым оттенком. Жидкость, т. кип. 115 °С/25 гПа.

Смесь (E)- и (Z)-изомеров (гераниэтиловый эфир и нерилэтиловый эфир).

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	90*	0,829–0,837	1,453–1,458	88
Dragoco	90	0,838–0,844	1,453–1,459	96

* В том числе 45–65% геранилэтилового эфира и 25–45% нерилэтилового эфира.

Может быть получен взаимодействием геранилхлорида с этилатом натрия в спиртовой среде.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.104. Цитронеллилэтиловый эфир

3,7-Диметил-1-этокси-6-октен, этиловый эфир цитронеллола, Citronellyl ethyl ether (RIFM, IFF). $C_{12}H_{24}O$; 184,32

С. А. 22810-10-2

Запах — свежий, цветочный, ноты розы, цитрусов, зелени. Жидкость. Обычно содержит примеси эфиров других терпеновых спиртов.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы эфиров терпеновых спиртов, в том числе эфиры: цитронеллола 60–80%, гераниола до 12%, нерола до 11%, тетрагидрогераниола до 13%. Продукт имеет d_4^{20} 0,809–0,820; n_D^{20} 1,435–1,445; т. всп. 84 °С.

Один из способов получения состоит во взаимодействии цитронеллилалкоголята с этилгалогенидом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15 %. Ограничений IFRA нет.

2.105. Эпоксид оцимена

2,6-Диметил-2,3-эпокси-5,7-октадиен, 2,2-диметил-3-(3-метил-2,4-пентадиенил)-оксиран, Myroxyde (Firm.).	$C_{10}H_{16}O$; 152,24
С. А. 69103-20-4	

В небольшом количестве содержится в петигреневом ЭМ.

Запах — травянистый с нотами лаванды, мускатного шалфея, опопонакса. Жидкость, т. кип. 35 °С/1,3 гПа.

Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Продажный продукт Firm. (1983, 1992) содержит не менее 65% (ГЖХ) суммы изомеров эпоксида и имеет d_{20}^{20} 0,883–0,895; n_D^{20} 1,475–1,480; т. всп. 70 °С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2 %. Ограничений IFRA нет.

2.106. Розеноксид

2-(2-Метил-1-пропенил)-4-метилтетрагидропиран, Rose oxyde (Arc. 2809, RIFM, Firm., Dragoco).	$C_{10}H_{18}O$; 154,25
С.А. 16409-43-1	

Содержится в розовом и гераниевом ЭМ.

Запах — резкий цветочный, при разбавлении — ноты розы, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 86–88°С/29 гПа, 70–71°С/15 гПа. Смесь *цис*- и *транс*-изомеров. Существует в (+)- и (-)-формах. После открытия этого ДВ М. Штоллем и др. в 1959 г. его производство было организовано на предприятии Firm. Вырабатывались три сорта продукта: а) рацемат, б) обогащенный *цис*-изомером ("CO"), в) левый.

Продукты Firm.	Минимальное содержание двух изомеров, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Rose oxyde, 1979	95	0,870–0,877	1,453–1,457	66
Rose oxyde CO, 1983	95	0,869–0,875	1,452–1,457	66
Rose oxyde laevo, 1983	95	0,868–0,878	1,453–1,457	64

В каталоге Firm. (1992) сохранился розеноксид "CO". Dragoco (1990) вырабатывает рацемический, правый и левый розеноксиды:

Продукты Dragoco	$[\alpha]_D^{20}$	Минимальное содержание двух изомеров, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Rose oxyde inact.	-2° ÷ +2°	95	0,873–0,879	1,454–1,459	68
Rose oxyde D	+23° ÷ +28°	95	0,873–0,879	1,454–1,460	75
Rose oxyde L	-2° ÷ -28°	98	0,872–0,879	1,454–1,459	68

Из многочисленных способов получения розеноксида, описанных в литературе (см. Naves Y.-R., Rivista Ital. EPPOS, 1978, 60, № 5, 265), для производства наиболее приемлемы:

1) способ сенсибилизированного фотоокисления цитронеллола и последующих преобразований (Schenk G. O. и др., пат. ФРГ 1137730, 7.04.61–22.06.67, РЖХ, 1968, 16Р479П; Patel J. S. и др., Indian Journ. Chem., 1978, B16, № 3, 188, РЖХ, 1979, 5 E31)

2) взаимодействие цитронеллола с надуксусной кислотой и последующая циклизация действием фосфорной кислоты (Eschinazi E. H., Cotter M. L., пат. США 3163658, 27.12.62–29.12.64, РЖХ, 1966, 7Р520П).

Розеноксид используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке в пределах 0,01–0,2%. Ограничений IFRA нет.

2.107. Дигидророзеноксид

2-(2-Метилпропил)-4-метил-тетрагидропиран, $C_{10}H_{20}O$; 156,27
Dihydrorosenoxid (BASF).

C.A. 13477-62-8

Запах — сильный цветочный, напоминает запах герани с мятно-травянистым оттенком. Жидкость, т. кип. 182–183°С/1013 гПа. Смесь *цис – транс*–изомеров.

Продажный продукт BASF (1987) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров дигидророзеноксида при соотношении *цис* : *транс* ~7:3. Он имеет d_{25}^{25} 0,839 – 0,843; n_D^{20} 1,430 – 1,434; т. всп. 52°С.

Один из способов получения состоит в каталитическом гидрировании соответствующего дигидропирана, который может быть приготовлен по методу, запатентованному в СССР, (Геворкян А. А. и др., авт. свид. 505643, 10.10.73, РЖХ, 1977, 3Р567П, авт. свид. 1057507, 1.07.82, РЖХ, 1985, 1Р486П).

OH + CHO —[H+]→ O —H2→ O

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.108. Флорол

2-(2-Метилпропил)-4-метил-тетрагидро-4-пиранол, $C_{10}O_{20}O_2$; 172,27
Florol (Firm.).

C.A. 63500-71-0

Запах — мягкий, цветочный с оттенком ландыша. Жидкость.

Продажный продукт Firm. (1992) имеет d_{20}^{20} 0,948–0,955; n_D^{20} 1,455–1,460; т. всп. >100°С.

Получение возможно взаимодействием 3-метил-3-бутенола с изовалериановым альдегидом в присутствии разбавленной серной кислоты (Геворкян А. А. и др., авт. свид. 620487, 28.03.77–17.07.78, РЖХ, 1979, 10Р611П)

OH + CHO → OH O

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.109. Неролоксид

4-Метил-2-(2-метил-1-пропенил)-3,6-дигидро-2Н-пиран, $C_{10}H_{16}O$; 152,24
Neroloxyde (Firm.), Nerol oxyde (Dragoco).

C.A. 1786-08-9

Содержится в ЭМ розы, герани.

Запах — сильный цветочный, ноты неролиевого масла, свежей зелени. Жидкость, т. кип. 68–72°С/9 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Firm., 1981, 1992	97	0,902–0,908	20/20	1,473–1,477	70
Dragoco, 1990	95	0,900–0,908	20/4	1,473–1,477	74

Может быть получен из нерола методами, подобными синтезам розеноксида (Naves Y.-R., Rivista Ital. EPPOS, 1978, 60, № 5, 265).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.110. Триметилвинилтетрагидропиран

2,2,6-Триметил-6-винил-тетрагидропиран, Limetal (Roure). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C.A. 7392-19-0

Содержится в ЭМ лиметты.

Запах — свежий лимонный с камфарно-эвкалиптовой нотой. Жидкость, т. кип. 162°C/1013 гПа, 50°C/16 гПа.

Продажный продукт Roure имеет $d_{20}^{20} \sim 0,870$; $n_D^{20} \sim 1,446$; т. всп. 58°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.111. Дезоксид

2-Метил-2-винил-5-изопропенил-тетрагидрофуран, Desoxide (Dragoco). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

C.A. 13679-86-2

В небольших количествах содержится в гераниевом и петигреневом ЭМ.

Запах — свежий, древесно-смолистый с нотами фруктов, лайма. Жидкость. Содержит изомеры с гидропирановым циклом.

Продажный продукт Dragoco (1981) имеет d_4^{20} 0,869 – 0,876; n_D^{20} 1,452 – 1,456; т. всп. 47°C.

Может быть получен дегидратацией линалоолоксида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

2.112. Линалоолоксид

2-Метил-2-винил-5-(α-гидрокси-изопропил)-тетрагидрофуран, Linalool oxide (Arc. 1804, RIFM, Dragoco, GIV). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C.A. 1365-19-1; 5989-33-3; 34995-77-2

Содержится в кориандровом, лавандовом, лавандиновом, линалоевом и других ЭМ.

Запах — сильный, приятный, древесно-цветочный. Жидкость, т. кип. 198°C/1013 гПа, 95°C/33 гПа, 50-51°C/4 гПа. Смесь *цис* – *транс*-изомеров. Содержит обычно до 10% 2,2,6-триметил-6-винилтетрагидропиран-3-ола.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} 1,15 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содерж. суммы изомеров (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Dragoco, 1981	95	0,939–0,944	1,451–1,455	65
GIV, 1984,	96	0,936–0,946	1,451–1,455	63

Может быть получен окислением линалоола надкислотами.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.113. Ацетат линалоолоксида

2-Метил-2-винил-5-(α-ацетокси-изопропил)-тетрагидрофуран, Linalool oxide acetate (Arc. 1805, PFW). $C_{12}H_{20}O_3$; 212,29

Содержится в черной смородине, лавандиновом и других ЭМ. Запах — фруктово-древесный. Жидкость, т. кип. 65-75°C/1,3 гПа. Смесь *цис* – *транс*–изомеров.

Обычно содержит до 10% ацетата 2,2,6-триметил-6-винил-тетрагидропиран-3-ола. В соответствии со спецификацией PFW (1983) продажный продукт содержит не менее 96% (ГЖХ) суммы изомерных ацетатов и имеет $d_{20}^{20} \sim 0,977$; $n_D^{20} \sim 1,448$; т. всп. 85°C.

Может быть получен ацетилированием линалоолоксида.

Используют в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

2.114. Геранилнитрил

3,7-Диметил-2,6-октадиен-1-нитрил, Geranyl nitrile (Arc. 1451, RIFM, GIV), Geranonitril (BASF), Citralva (IFF) — $C_{10}H_{14}N$; 149,24

C.A. 5146-66-7, 5585-39-7; 31983-27-4

Запах — сильный лимонный с травянистой нотой. Жидкость, т. кип. 110°C/13 гПа, 57-58°C/2 гПа.

Смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 3,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 4,3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ, 2 изомера), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	75	0,869-0,876	1,470-1,477	>100
IFF, 1992	95	0,863-0,871	1,471-1,476	>100
BASF, 1987	98	0,861-0,867	1,474-1,476	107

Может быть получен по обычной схеме превращением цитраля в оксим и дегидратацией последнего.

Запатентованы также способы получения геранилнитрила взаимодействием 2-метил-2-гептен-6-она с цианоуксусной кислотой (Mitchel P. W. D., Blumenthal J. H., пат. США 3655722, 26.01.70-11.04.72, РЖХ, 1972, 24Р572П) или с ацетонитрилом (Бордюкова О. О., Эрман М. Б. и др., авт. свид. 1049476, 7.09.81-22.06.83).

Геранилнитрил используют главным образом в отдушках для мыла и товаров бытовой химии при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.115. Этилгеранилнитрил

3,7-Диметил-2(3),6-нонадиен-нитрил, Lemonile (GIV). — $C_{11}H_{17}N$; 163,27

C.A. 61792-11-8

Запах — сильный, лимонно-"одеколонный". Жидкость. Смесь (E)-(Z)-изомеров, содержит также изомер с положением двойных связей 3,6.

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы изомеров этилгеранилнитрила и имеет d_4^{20} 0,862 – 0,870, n_D^{20} 1,472-1,477, т. всп. 95°C. Может быть получен из этилцитраля превращением в соответствующий оксим и его дегидратацией.

Используется главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

2.116. Цитронеллилнитрил

3,7-Диметил-6-октен-1-нитрил, Citronellyl nitrile (RIFM, Quest), Citronellylnitril (BASF, Miltitz), Agrunitril (Dragoco), Citronalva (IFF). — $C_{10}H_{17}N$; 151,26

C.A. 51566-62-2

Запах — сильный цитрусовый с альдегидной нотой. Жидкость, т. кип. 110-111°C/20 гПа, 98-100°C/16 гПа, 80-81°C/6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 5,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Quest, 1989	95	0,846-0,854	20/20	1,448-1,452	101
BASF, 1989	98	0,842-0,846	25/25	1,448-1,450	97
Dragoco, 1982	80 (основ. пик)	0,855-0,860	20/4	1,449-1,452	>110
Miltitz, 1991	95	0,842-0,849	20/20	1,447-1,455	97
IFF, 1992	85	0,842 0,850	25/25	1,448 1,453	85

Получают из цитронеллаля через оксим, дегидратацию которого осуществляют нагреванием с уксусным ангидридом. Используют главным образом в отдушках для мыла, моющих средств и других товаров бытовой химии при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

2.117. Диметилвинилгексенонитрил

2,5-Диметил-2-винил-4-гексенонитрил, Citrowanil (Wacker). $C_{10}H_{15}N$; 149,24

Запах — цитрусовый с нотами смолы и зелени. Жидкость, т. кип. 83–85°C/2 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~96% (ГЖХ) названного нитрила и имеет $d_4^{20} \sim 0,841$; n_D^{20} 1,450 – 1,456; т. всп. 68°C.

Может быть получен оксимированием соответствующего альдегида (Nerolialdehyd) и дегидратацией образующегося оксима.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

3. ЦИКЛИЧЕСКИЕ ТЕРПЕНОИДЫ

3.1–3.30. Углеводороды, спирты, простые эфиры
3.31–3.63. Альдегиды и кетоны
3.64–3.96. Сложные эфиры
3.97–3.106. Оксиды, бициклические и трициклические простые эфиры

3.1–3.30. УГЛЕВОДОРОДЫ, СПИРТЫ, ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ

3.1. Лимонен

1,8-п-Ментадиен, 1-метил-4-изопропенил-1-циклогексен, d-Limonene (Arc. 1800, RIFM, IFF), l-Limonene (Arc. 1801, RIFM), Limonene pure O (H.+R.). $C_{10}H_{16}$; 136,24

C.A. 138-86-3 (±);
5989-27-5 (+);
5989-54-8 (–).

Содержится в виде (+)-формы в апельсиновом ЭМ (до 95%) и практически во всех цитрусовых, а (+) или (–)-формы — в очень многих ЭМ. Обладает инсектицидными свойствами.

Запах — приятный цитрусовый. Жидкость, т. кип. 178°C/1013 гПа; 61°C/17 гПа.

Для (+)-лимонена $[\alpha]_D^{20}$+126,6°, для (–)-лимонена $[\alpha]_D^{20}$–126,3°.

Острая токсичность по RIFM (1975 и 1978) для (+)- и (–)-форм: oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$[\alpha]_D^{20}$	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	95	+90÷+103°	0,838–0,842	1,470–1,474	62
IFF, 1992	94	+87÷+102°	0,837–0,845	1,470–1,474	46

Обычно лимонен получают фракционированной дистилляцией смесей терпенов цитрусовых масел, получаемых при так называемом обестерпенивании этих ЭМ.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет. (±)-Лимонен (дипентен), содержащийся в скипидаре и продуктах его

переработки, в парфюмерных композициях практически не используется.

3.2. Бисаболен

1-Метил-4-(6-метил-5-гептен-2-илиден)-1-циклогексен, Bisabolene (Arc. 348, RIFM), Bisabolene M (GIV). $C_{15}H_{24}$; 204,36

C.A. 495-62-5

Входит в состав пихтового, бергамотного, санталового и других ЭМ.

Запах — сладкий, бальзамический, древесный. Жидкость, т. кип. 110-112°С/5,4 гПа. Смесь α-, β- и γ-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт в соответствии со спецификацией GIV (1973) имеет следующие показатели: иодное число 130-180; d_{25}^{25} 0,857 – 0,870; n_D^{20} 1,496 – 1,499.

Может быть получен при дегидратации неролидола.

Используется в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций. Ограничений IFRA нет.

3.3. *альфа*-Пинен

2-Пинен, 2,6,6-триметилбицикло-[3,1,1]-2-гепетен, alpha-Pinene (Arc. 2619, RIFM, IFF). $C_{10}H_{16}$; 136,24



C.A. 80-56-8

Основной компонент скипидара, содержится во многих ЭМ.

Запах — смолистый, хвойный. Жидкость, т. кип. 156°С/1013 гПа; $[\alpha]_D^{20} \pm 50{,}6°$.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 3,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) *альфа*–пинена и имеет d_4^{20} 0,854 – 0,862; n_D^{20} 1,463 – 1,467; т. всп. 31°С

В РФ вырабатывается под торговым названием "пинен технический", содержит ~90% *альфа*–пинена и имеет d_4^{20} 0,855 – 0,859; n_D^{20} 1,466 – 1,467; т. всп. 33°С.

Получают ректификацией скипидара. Используют в отдушках для товаров промышленного назначения и бытовой химии при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

Очищенный *альфа*-пинен, как и скипидар, в больших количествах используются для производства душистых веществ.

3.4. *бета*-Пинен

Нопинен, 2-метилен-6,6-диметил-бицикло-[3,1,1]-гептан, *beta*-Pinene (Arc. 2620, RIFM), *beta*-Pinene coeur (IFF). $C_{10}H_{16}$; 136,24

С. А. 127-91-3

Содержится в скипидаре, полученном из некоторых сортов сосны, а также из ели и лиственницы.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Запах — древесно-смолистый. Жидкость, т. кип. 164°С/1013 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) *бета*-пинена и имеет d_4^{20} 0,864–0,872; n_D^{20} 1,476–1,481; т. всп. 42°С.

Традиционный метод получения состоит в выделении его из определенных сортов скипидара методом фракционированной ректификации. Технический *бета*-пинен, используемый в больших количествах для получения мирцена — полупродукта синтеза душистых веществ, вырабатывается из *альфа*-пинена способом каталитической изомеризации, совмещенной с ректификацией (Дерфер Д. М., пат СССР 244964, 17.02.65-17.10.69, РЖХ 1970, 23Р568П; Платэ А. Ф. и др., авт. свид. СССР 179303, 8.02.1966, Журн. орг. хим. 1965, 1, № 3, 506).

Очищенный *бета*-пинен может быть использован в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

3.5. 3-Карен

Δ3-Карен, 3,7,7-триметилбицикло-[4,1,0]-3-гептен, Δ^3-Carene (Arc. 570). $C_{10}H_{16}$; 136,24

С. А. 13466-78-9

Содержится в скипидаре и некоторых ЭМ.

Запах — сильный, сосновый с оттенком запаха лимонена. Жидкость, т. кип 170–171°C/1013 гПа; 70°C/13,3 гПа.

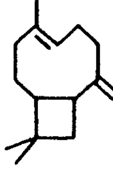
Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 4,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В РФ вырабатывается технический продукт, содержащий не менее 92% 3-карена и имеющий d_4^{20} 0,861–0,863; n_D^{20} 1,471–1,474.

В парфюмерных композициях и отдушках используют довольно редко. Применяют в качестве исходного сырья для синтеза душистых веществ.

3.6. Кариофиллен

8-Метилен-4,11,11-триметилбицикло[7,2,0]-4-ундецен, *beta*-Caryophyllene (Arc. 584), Caryophyllene (RIFM, GIV). — $C_{15}H_{24}$; 204,36



С. А. 87-44-5

Содержится в ЭМ гвоздики, ЭМ *Cinnamomum camphora* и др.

Запах — мягкий, гвоздичный. Жидкость, т. кип. 259–261°C/1013 гПа 126°C/16 гПа; 113°C/10,6 гПа; 103°C/5,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

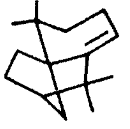
В соответствии со спецификацией GIV (1961) имеет d_{25}^{25} 0,897–0,910; n_D^{20} 1,498–1,504; т. всп. 97°C.

Традиционный метод получения — фракционированная вакуум-дистилляция остатка гвоздичного ЭМ от выделения эвгенола щелочной обработкой.

Прежде использовался как таковой в парфюмерных композициях и отдушках. В настоящее время чаще подвергается химической переработке для производства более ценных душистых веществ, например ацетилкариофиллена.

3.7. Изолонгифолен

2,2,7,7-Тетраметилтрицикло-[6,2,1,$0^{3,8}$]-3-ундецен, Isolongifolene. — $C_{15}H_{24}$; 204,36



Запах — древесный с фруктово-цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 113–114°C/9,3 гПа; d_4^{25} 0,930; n_D^{25} 1,498.

Продажный продукт, вырабатываемый в КНР, содержит 80% (ГЖХ) изолонгифолена и имеет d_{25}^{25} 0,927–0,936; n_D^{20} 1,494–1,500; т. всп. 116°C.

Получают каталитической изомеризацией лонгифолена на кислотных катализаторах или с эфиратом BF_3, или на катионитах. Лонгифолен содержится в некоторых сортах терпентинных масел, в частности в маслах *Pinus longifolia*, *Pinus carabaea* и др.

Может быть использован в парфюмерных композициях и отдушках, однако чаще всего применяется в качестве сырья для синтеза кислородсодержащих производных, которые являются ценными душистыми веществами.

3.8. Ментол

п-Ментан-3-ол, 2-изопропил-5-метилциклогексанол, laevo-Menthol (Arc. 1840), dl-Menthol (Arc. 1841), l-Menthol (RIFM, H.+R., TAK), Menthol racemic (RIFM, H. + R.). — $C_{10}H_{20}O$; 156,27

С. А. 89-78-1, натур. (–); 2216-50-5, (–); 15356-70-4, (±).

Содержится в ЭМ перечной мяты, японской мяты, немного — в гераниевом и др. ЭМ.

Запах — мятный, холодящий эффект. Кристаллический продукт, т. кип. 216,5°C/1013 гПа; 99°C/13,3 гПа; $P_{20} 4,9 \cdot 10^{-2}$ гПа; n_D^{20} 1,460–1,462 (переохл.).

Острая токсичность по RIFM (1976): для (–) ментола oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики); для (±)-ментола oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

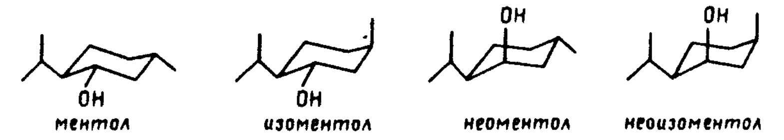
Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	Т. пл. или т. заст., °C	$[\alpha]_D^{20}$	Т. всп., °C	Примечание
GIV, 1961, рацемат	98	25–31	±2°	93	
GIV, 1961, Methol 20	98	27–31	–15÷–25°	93	
РФ, натуральный	99	41–44	Не нормируется	70	

Продолжение табл

Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	Т. пл. или т. заст., °С	$[\alpha]_D^{20}$	Т. всп., °С	Примечание
РФ, рацемат, смесь изомеров	99	28–32	—	86	(±)-ментол ~80%
H. + R., 1988 l-Menthol, cryst.	99,7	42–43	–51÷–54°	101	
H. + R., 1988, рацемат	99	27–28 или 30,5–32	—	100	
TAK, 1987	99	42–43	Не нормируется	85	

Пространственные изомеры ментола:



отличаются друг от друга по физическим и токсикологическим свойствам. Различия в температуре кипения (ментол 216,5°С, изоментол 218,6°С, неоментол 211,7°С, неоизоментол 214,6°С) позволяют выделять ментол методом вакуум-ректификации из смесей с изо- неоизомерами.

Традиционный способ получения (–)-ментола (Китай, Бразилия, Индия) — вымораживание из ЭМ *Mentha arvensis*. Высокое (70–80%) содержание (–)-ментола в этом масле позволяет получать кроме кристаллического ментола "дементолизированное масло" (40–50% ментола), которое также является товарным продуктом.

Полусинтетические методы получения (–)-ментола базируются на использовании цитронеллаля, выделяемого перегонкой цитронеллового масла, или пиперитона, содержащегося в эвкалиптовом масле *Eucalyptus dives*.

(+)-Цитронеллаль подвергают циклизации и полученную смесь изомеров изопулегола разделяют и гидрируют (или гидрируют и разделяют), получая оптически активный (–)-ментол.

Каталитическое гидрирование (–)-пиперитона приводит к получению смеси изомеров ментола, из которой выделяют (–)-ментол.

Промышленный синтез (±)-ментола состоит в каталитическом гидрировании тимола. Полученную при этом смесь (~60% (±)-ментола, ~ 30%(±)-неоментола и ~ 10%(±)-изоментола) подвергают вакуум-

ректификации на эффективных колоннах, выделяя (±)-ментол нужной степени чистоты.

Фракции, обогащенные нео- и изоментолом изомеризуют в атмосфере водорода в присутствии катализатора гидрирования тимола до изомерной смеси ментолов, близкой по составу к смеси, взятой на ректификацию.

Разработанный ВНИИСНДВ промышленный метод синтеза ментола из *мета*-крезола (Хейфиц Л. А., Кологривова Н. Е., Свадковская Г. Э. и др., авт. свид. 167842, 8.06.63–5.02.65, 173786, 28.05.63–6.08.65, Журнал прикладной химии, 1963, 36, 2740) был реализован пуском в 1967 г. производства в г. Калуге мощностью 100 т в год.

В начале 70-х годов фирма H. + R. начала производить синтетический ментол из *мета*-крезола в количестве более 1000 т в год. Большим достижением этой фирмы явилась разработка технологии получения из рацемата (–)-ментола, идентичного природному (Fleischer J., Bauer K., Hopp R., пат. ФРГ 2109456, 27.02.71–10.03.77, РЖХ, 1978, 2Н101П).

Ментол широко используется в пищевых ароматических эссенциях, отдушках для зубных паст, некоторых парфюмерных изделий. Ограничений IFRA нет.

3.9. Дигидрокарвеол

п-8-Ментен-2-ол, 2-метил-5-изопропенилциклогексанол, Dihydro carveol (Arc. 926, IFF), Dihydrocarveol (RIFM), Carhydranol (IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 619-01-2

Содержится в ЭМ тмина, некоторых разновидностей мяты (например, *Mentha longifolia*), сельдерея.

Запах — тмина, фенхеля, травянистый. Жидкость. Смесь пространственных изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Дигидрокарвеол, вырабатываемый IFF (1992), содержит спиртов ≥95 (ГЖХ), в том числе основного изомера 60–80% (ГЖХ), и имеет d_4^{20} 0,920–0,928; n_D^{20} 1,477–1,482; т. всп. >100°С.

Простейший способ получения — селективное каталитическое гидрирование карвона.

26*

Используется в небольших количествах (обычно до 5%) в цветочных и фантазийных парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.10. Терпинеол

п-1-Ментен-8-ол, *alpha*-Terpineol (Arc. 2877, BBA, IFF). Terpineol (GIV, H. + R.).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 98-55-5

Содержится в сосновом, лавандиновом, апельсиновом, кайепутовом и многих других ЭМ.

Запах сильно зависит от степени чистоты, имеет оттенки сосны, сирени, лайма. Склонная к кристаллизации вязкая жидкость, т. кип. 218–219°С/1013 гПа; 98–99°С/13,3 гПа; 85°С/4 гПа; P_{20} $3{,}1\cdot10^{-2}$ гПа; γ_{20} 28,6 дин/см; σ_{20} 59,4 спуаз; т. пл. 35°С (*альфа*-изомер).

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Содержание спиртов %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп. °С	Примечание
GIV, 1961, экстра	98	0,931–0,936	25/25	1,483–1,485	90	
GIV, 1961, прима	98	—	—	1,483–1,485	90	
BBA, 1990, Lindenol	99	—	—	—	92	Т. пл. 30°С
BBA, 1990, *alpha*-Terpineol	99	~0,934	20/20	~1,485	92	α-изомер 93% (ГЖХ)
BBA, 1990, Terpineol 900	97	~0,934	20/20	~1,485	92	α-изомер 90% (ГЖХ)
H. + R., 1988, Chem. pure	80	0,931–0,935	25/25	1,481–1,486	95	
РФ, 1990	98	0,934–0,941	20/4	1,480–1,483	94	
IFF, 1992, *alpha*-Terpineol	94	0,931–0,936	25/25	1,481–1,485	91	α- и γ-изомеры 94% (ГЖХ)
IFF, 1992, Terpineol	95	0,928–0,935	25/25	1,480–1,484	90	α-изомер 57–65% (ГЖХ)
IFF, 1992, Terpineol coeur	95	0,930–0,936	25/25	1,481–1,487	91	α-изомер 67–75% (ГЖХ)
IFF, 1992, Terpineol PFG	95	0,931–0,935	25/25	1,481–1,486	91	α-изомер 55–75% (ГЖХ)

Терпинеол был одним из первых душистых веществ, производство которого было освоено в промышленном масштабе (1885 г).

Многие годы промежуточным продуктом служил терпингидрат, получаемый гидратацией *альфа*-пинена с присоединением трех молекул воды в присутствии кислого катализатора:

В последнее время осуществляют одностадийную гидратацию *альфа*-пинена до терпинеола, используя водно-ацетоновый раствор серной кислоты (А. И. Бибичева и др., Масло-жировая пром-сть, 1984, № 11, с. 24).

Терпинеол в больших количествах используют в отдушках различного назначения, особенно в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

3.11. 1-Терпинен-4-ол

п-1-Ментен-4-ол, 1-метил-4-изопропил-4-гидроксициклогексен, 4-Terpinenol (Arc. 2876, RIFM), Terpinenol-4 (Dragoco). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

OH

С. А. 562-74-3

Содержится в лавандовом масле, скипидаре.

Запах — пряный, земли, зелени, плесневo-древесный оттенок. Жидкость, т. кип. 212–214°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 1,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2,5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый Dragoco, содержит ~96% (ГЖХ) терпиненола-4 и имеет d_4^{20} 0,930–0,935; n_D^{20} 1,477–1,480; т. всп. 87°С.

Используют в небольших дозах при создании искусственных эфирных масел типа ЭМ розы, герани и др. Ограничений IFRA нет.

3.12. Дигидротерпинеол

п-Ментан-8-ол, Dihydro-*alpha*-terpineol (Arc. 970, RIFM), Dihydro terpineol (IFF). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

OH
OH

Дигидро-α-терпинеол *Дигидро-β-терпинеол*

С. А. 21129-27-1

Запах — сирени, лайма, сосновая нота меньше, чем у терпинеола.

Смесь *цис-* и *транс*-изомеров. Часто содержит дигидро-*бета*-терпинеол, также в *цис-* и *транс*-формах. Жидкость, т. кип. 110°С/40 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит ≥95% (ГЖХ) суммы изомерных дигидротерпинеолов, в том числе α-*цис* 20–40%, α-*транс* 20–35%, β-*цис* 10–25%, β-*транс* 10–30% и имеет d_4^{20} 0,905–0,913; n_D^{20} 1,462–1,467; т. всп. 79°С.

Продукт широко используется в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Дозировка в композициях — до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.13. Майол

цис-1-Гидроксиметил-4-изопропилциклогексан, 7-гидрокси-п-ментан, Mayol (Firm.). $C_{10}H_{20}O$; 156,27

OH

С. А. 13828-37-0

Запах — свежий цветочный, оттенки запаха туберозы, магнолии, ландыша.

Продукт, вырабатываемый Firm. (1983), содержит ⩾ 98% (ГЖХ) смеси *цис-транс*-изомеров с преобладанием *цис*-формы и имеет т. кип. 115°С/13,3 гПа; d_{20}^{20} 0,910–0,918; n_D^{20} 1,466–1,471; т. всп. > 99°С.

Токсичность oral LD_{50} 3,3–4,9 г/кг (крысы).

Спецификация Firm. (1992) предусматривает d_{20}^{20} 0,912–0,920; n_D^{20} 1,466–1,471; т. всп. 99°С.

По патенту Firm. (Thomas A. F., Ohloff G., швейц. пат. 581592, 7.06.73–15.11.76, РЖХ 1977, 23Н92П) майол получают трехстадийным синтезом из *бета*-пинена; фракцию, обогащенную *цис*-изомером, выделяют ректификацией. По всей вероятности, в производстве реализован одностадийный процесс гидрирования куминового альдегида на специальных катализаторах.

Используется в парфюмерных композициях в дозах 0,5–5%. Ограничений IFRA нет.

3.14. 9-Гидроксиметил-*пара*-1-ментен

1-Метил-4(1-метил-3-гидроксипропил)-1-циклогексен, Cyclomethylene citronellol, CMC (Firm.). $C_{11}H_{20}O$; 168,28

OH

С. А. 15760-18-6

Запах — травянистый, цветочный. Жидкость, т. кип. 95°С/1,3 гПа. Острая токсичность, по данным Firm., LD_{50} 2,6 г/кг.

Продукт вырабатываемый Firm. (1989), имеет чистоту 92–96% (ГЖХ); d_{25}^{25} 0,934; $n_D^{20} \sim 1,486$; $[\alpha]_D + 86,5 \pm 1$°C; т. всп. >100°C. Спецификация Firm. (1992) предусматривает d_{20}^{20} 0,932–0,942, n_D^{20} 1,484–1,488.

Один из путей промышленного получения состоит в гидроформилировании (+)-лимонена и последующем гидрировании.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.15. Бисаболол

альфа-Бисаболол, 2-(4-метил-3-циклогексенил)-6-метил-5-гептен-2-ол, 1-метил-4(1,5-диметил-1-гидрокси-4-гексенил)-циклогексен, Bisabolol (Arc. 349), *alpha*-Bisabolol (GIV, BASF), Dragosantol (Dragoco).

$C_{15}H_{26}O$; 222,38

OH

Содержится в ЭМ ромашки (*l*-форма, >50%), лавандовом и др. Обладает противовоспалительными для кожи человека свойствами и слабым своеобразным запахом. Вязкая жидкость, т. кип. 153°C/16 гПа; 129–130°C/3,4 гПа; d_4^{20} ~0,921; n_D^{20} 1,492–1,496.

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	$[\alpha]_D^{20}$	d_4^{20}	n_D^{20}
BASF, 1984 *Alpha* Bisabolol nat.	95	-55°+-58°	—	1,493–1,497
BASF, 1984 *Alpha* Bisabolol rac.	85	—	—	1,492–1,498
Dragoco, 1985 Dragosantol	85	—	0,922–0,928	1,492–1,498
GIV, 1986 Bisabolol *alpha*	85–100	—	0,926–0,931	1,493–1,498

Синтетический (±)-бисаболол обычно получают через образование его ацетата при действии серной кислоты на смесь неролидола и ледяной уксусной кислоты.

Используется в парфюмериых композициях или отдушках для косметики. Иногда вводится непосредственно в косметические кремы и лосьоны (0,2–0,5%).

3.16. Метиловый эфир терпинеола

альфа-Терпинилметиловый эфир, 8-метокси-*пара*-1-ментен, Orange flower ether (IFF).

$C_{11}H_{20}O$; 168,28

OCH_3

C. A. 14576-08-0

Запах — цветочный, цитрусовый, оттенки запаха грейпфрута, бергамота.

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), представляет собой жидкость чистоты ⩾90% (ГЖХ) с d_4^{20} 0,897–0,905 n_D^{20} 1,464–1,468; т. всп. 82°C. Содержание *альфа*-изомера составляет 65–85%.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Дозировка — обычно до 5%.

Один из возможных путей получения — присоединение метанола к лимонену.

3.17. 1,8-Цинеол

Эвкалиптол, 1,8-Cineole (Arc. 616), Eucalyptol (RIFM, H. + R.).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

O

C. A. 470-82-6

Содержится во многих ЭМ, в том числе в эвкалиптовом (*Eucalyptus globulus*, ~85%), лавровом, розмариновом и др.

Запах — сильный, камфарный. Жидкость, т. заст. ~0°C и т. кип. 177-178°C/1013 гПа; 60°C/11 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,5 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг.

Продукт, вырабатываемый H. + R. (1988), содержит 1,8-цинеола ⩾98% (ГЖХ) и имеет $d_{25}^{25} 0,922 - 0,927$; n_D^{20} 1,456–1,460; т. всп. 48°C.

Получают в промышленности исключительно выделением из ЭМ.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA не имеется.

3.18. Теминол

1-(2,2,6-Триметилциклогекс-1-ил)-пентан-3-ол, тетрагидрометилионол, 10-метилмегастигман-9-ол, Maderan (H.+R.)

$C_{14}H_{28}O$; 212,37

С. А. 60241-53-4

Запах — мускусно-древесный, ноты сантала, ириса. Жидкость, т. кип. 280°С/1013 гПа; 145°С/13,3 гПа.

Получают исчерпывающим каталитическим гидрированием нормального метилионона. Парфюмерные свойства находятся в прямой зависимости от изомерного состава исходного продукта.

В РФ вырабатывается теминол, содержащий не менее 90% (ГЖХ) спирта и имеющий n_D^{20} 1,472–1,474. "Maderan" (H. + R., 1988) содержит ≥95% (ацетил.) спиртов и имеет d_{25}^{25} 0,905–0,910; n_D^{20} 1,474–1,478; т. всп. 132°С.

Продукт используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.19. Тимберол

1-(2,2,6-Триметилциклогекс-1-ил)-гексан-3-ол, 2,2,6-триметил-1-(3-гидроксигексил-циклогексан, 10-этилмегастигман-9-ол, Timberol (Dragoco), Norlimbanol (Firm.).

$C_{15}H_{30}O$; 226,41

С. А. 70788-30-6

Запах — древесный, оттенки запаха серой амбры, сандалового дерева, стойкий. Жидкость, т. кип. 125°С/4 гПа.

Тимберол, вырабатываемый Dragoco, содержит ≥85% (ГЖХ) изомерных спиртов и имеет d_{20}^{20} 0,896 – 0,906; n_D^{20} 1,468 – 1,476; т. всп. >110°С.

Получают конденсацией цитраля с пентан-2-оном с последующими циклизацией псевдопродукта и исчерпывающим каталитическим гидрированием (Klein E., Rojahn W , заявка ФРГ 2807584, 22.02.78 30 08.79, РЖХ 1980, 14Р509П).

Применяют для парфюмерных композиций и отдушек различного назначения. Небольшие дозы (0,1–1%). оказывают существенное влияние на запах композиции. Ограничений IFRA нет.

3.20. Виктол

5-Метил-1-(2,2,6-триметил-циклогекс-1-ил)-гексан-3-ол, 10-изопропилмегастигман-9-ол, Viktol (РФ).

$C_{16}H_{32}O$; 240.44

Запах — древесно-мускусный с оттенком ириса, стойкий. Виктол, вырабатываемый в РФ, представляет собой жидкость с т. кип. 118-123°С/1,3 гПа, содержащую >88% спиртов, определяемых ацетилированием, и имеет n_D^{20} 1,472–1,475.

Получают конденсацией цитраля с метилизобутилкетоном и последующими циклизацией и исчерпывающим каталитическим гидрированием (Войткевич С. А., Коломеер Г. Г. и др., авт. свид. 1082780, 20.12.82–30.03.84, Б. И. № 12, 1984):

Применяют для парфюмерных композиций и отдушек различного назначения. Даже небольшие дозы (от 0,1–0,2%) оказывают значительное влияние на запах композиции.

3.21. Борнеол

эндо-2-Гидроксиборнан, *эндо*-2-борнанол, *эндо*-2-гидроксикамфан, 1,7,7-триметил-2-эндо-гидроксибицикло-[2,2,1]-гептан, Borneol (Arc, 350, 351, RIFM).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 464-45-9; 507-70-0

(+)-Борнеол содержится в ЭМ лаванды, мускатного шалфея, розмарина, а также в некоторых сортах камфарных ЭМ. (–)-Борнеол найден в кориандровом, цитронелловом, пихтовом и др. ЭМ.

Запах — камфарный с перечной нотой. Кристаллический продукт, т. пл. 208°C; т. кип. 214°C/1013 гПа; $[\alpha]_D^{20} \pm 37,9°$; т. всп. 65°C.

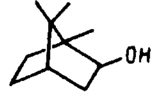
Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 6,5 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 2$ г/кг (кролики).

Продажный (–)-борнеол получают выделением из эфирных масел или омылением природного (–)-борнилацетата из пихтового ЭМ (*Abies sibirica*). Он обычно содержит до 40% изоборнеола и имеет $[\alpha]_D^{20}$ от –18° до –28°. (±)-Борнеол может быть получен сопровождающимся изомеризацией омылением (±)-изоборнилацетата (Sen T. и др., Rivista Ital. EPPOS 1979, **61**, № 3, РЖХ, 1979, 24Р557).

Используется в парфюмериых композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.22. Изоборнеол

экзо-2-Гидроксиборнан, *экзо*-2-гидроксикамфан, *экзо*-2-борнанол, Isoborneol (Arc. 352, RIFM). $C_{10}H_{18}O$; 154,25



C. A. 124-76-5

В природных ЭМ встречается реже, чем борнеол, и обычно сопровождает последний. В частности, в пихтовом масле наряду с борнилацетатом имеется немного изоборнилацетата.

Запах — камфарный. Кристаллы, т. пл. 212°C и т. кип. 214/1013 гПа; $[\alpha]_D^{20} \pm 33,6°$.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 5,2 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Изоборнеол является исходным продуктом синтеза камфары. Он получается из камфена через образование изоборнилформиата или изоборнилацетата.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.23. Миртенол

10-Гидрокси-2-пинен, Myrtenol (Arc. 2294, BBA). $C_{10}H_{16}O$; 152,23

C. A. 515-00-4

В свободном виде и в виде ацетата содержится в эвкалиптовом (*Eucalyptus globulus*) и миртовом ЭМ.

Запах — древесно-травянистый, пряный. Жидкость, т. кип. 222°C/1013 гПа; 86–88°C/6 гПа; d_4^{20}0,978; n_D^{20} 1,496.

BBA вырабатывает миртенол чистотой ~98% (ГЖХ), который имеет т. всп. 94°C.

Миртенол может быть получен окислением *альфа*-пинена или изомеризацией эпокси-*бета*-пинена.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.24. Нопол

10-Гидроксиметил-2-пинен, 6,6-диметил-2-(2-гидроксиэтил)-бицикло[3,1,1]-2-гептен, Nopol (Arc. 2383, RIFM, BBA), Diheptol (Dragoco). $C_{11}H_{18}O$; 166,27

C. A. 128-50-7

Запах — мягкий, древесно-камфарный. Жидкость, т. кип. 235–236°C/1013 гПа; 110–111°C/13 гПа; d_4^{25}0,964; n_D^{25} 1,492.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 0,9 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый BBA, содержит ~95% (ГЖХ) названного спирта и имеет т. всп. >100°C.

Промышленный метод синтеза состоит во взаимодействии *бета*-пинена с параформом по реакции Принса (в автоклаве при 180°C, Bain J. P., Journ. Amer. Chem. Soc., 1946, **68**, № 4, 638).

В РФ прежде вырабатывался ~93%-ный нопол ($d_4^{20} \sim 0,964$; n_D^{20} 1,492–1,494) из *бета*-пинена и параформа при катализе $ZnCl_2$ (Л. С. Авакова и др., Труды ВНИИСНДВ, вып. IX, 1971, с. 111).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

3.25. Камфенилкарбинол

8-Гидроксиметилкамфен, 2-(2-гидроксиэтилиден)-3,3-диметилнорборнан, 2-(2-гидроксиэтилиден)-3,3-диметил-цикло[2,2,1]гептан, Patchomint (IFF), Patchenol (BBA), 3,3-Dimethyl-Δ^2-*beta*-norbornane-2-ethanol (Arc. 1028). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

C. A. 2226-05-3

Запах — древесно-камфарный, ноты пачули, мяты. Вязкая жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) должен иметь при анализе ГЖХ типичный хроматографический профиль и содержать не менее 75% названного спирта; d_4^{20} 0,982 – 0,989; n_D^{20} 1,501–1,505; т. всп. >100°С.

Получают, по всей вероятности, из камфена и формальдегида (или параформа) по реакции Принса.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

3.26. Вальтерол

4-Гидроксиметил-2-карен, Turiol-*gamma* (Dragoco). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

Запах — характерный цветочный с древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 115°С/2,7 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Dragoco, 1989	—	0,960–0,965	1,494–1,497	107
РФ, 1972	95 (ацетил.)	~0,966	1,495–1,496	—

Получают омылением соответствующего ацетата (G. Ohloff, H. Farnow, Lieb. Ann. Chem. 1958, **613**, 43, Л. С. Авакова, С. Д. Кустова, Труды ВНИИСНДВ, вып. VII, 1965, с. 29) или непосредственно из 3-карена по Принсу (Мануков Э. Н. и др., авт. свид. 1373702, 9.06.86–15.02.88, РЖХ, 1989, 3Р2032П).

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и моющих средств. Ограничений IFRA нет.

3.27. Амбринол

2-Гидрокси-2,5,5-триметил-8-окталин, Ambrinol (Arc. 108, Firm.). $C_{13}H_{22}O$; 194,32

C. A. 71832-76-3

Один из компонентов природной серой амбры. Запах — сильный амбровый с животным оттенком. Жидкость, т. кип. 76–90°С/0,13 гПа.

Firm. (1983) вырабатывает продукт, содержащий 80% амбринола (ГЖХ, сумма трех изомеров) с d_{20}^{20} 0,945–0,962; n_D^{20} 1,488–1,499; т. всп. >100°С. Спецификация Firm. (1992) предусматривает d_{20}^{20} 0,940 – 0,960; n_D^{20} 1,485–1,498.

Один из способов получения амбринола состоит в термической циклизации *бета*-ионона и последующем селективном каталитическом гидрировании диенового гидроксилсодержащего продукта циклизации (Strickler H., швейц. пат. 597118, 28.07.76–31.03.78, РЖХ 1979, 1Р697П).

Применяется в парфюмерных композициях, как правило, в малых дозах из-за высокой цены. Ограничений IFRA нет.

3.28. Цедрол

10-Гидрокси-2,2,6,10-тетраметил-трицикло $[5,3,1,0^{3,7}]$ундекан, Cedrol (Arc. 598, RIFM, GIV, IFF), Cedrenol, Cedrenol B (IFF). $C_{15}H_{26}O$; 222,38

C. A. 77-53-2

Содержится во многих ЭМ, из которых наибольшее промышленное значение имеют *Juniperus virginiana, J. procera, J. mexicana, Cedrus atlantica.*

Запах — мягкий, древесный (кедровый), зависит от исходного сырья и степени очистки.

Структура молекулы цедрола — см. G. Storc, F. H. Clarce, Journ. Amer. Chem. Soc. 1961, **83**, 3114; V. Amirthalingam и др., Acta crystallogr. 1972, **B28**, № 5, 1340, РЖХ 1972, 19Б472; В. А. Хан и др., Химия природных соединений, 1985, № 1, с. 41.

В чистом виде — кристаллы с т. пл. 86°С, т. кип. 290–292°С/1013 гПа; 135°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975) — derm. LD_{50} > 5 г/кг.

Коммерческие продукты

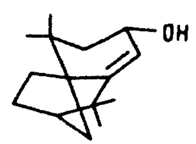
Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	Метод анализа	d_{25}^{25} или n_D^{20}	Т. пл., °C	Т. всп., °C
GIV, 1961 Cedrol crist.	97	Формил.	—	≥79	—
GIV, 1961 Cedrol prime	60	Формил.	0,970–0,990	—	—
IFF, 1992 Cedrol crist.	90	ГЖХ	—	≥75	—
IFF, 1992 Cedrenol	65	ГЖХ	1,506–1,514	—	81
IFF, 1992 Cedrenol B	60	ГЖХ	1,508–1,514	—	81

Получается десятками тонн фракционированной вакуум-перегонкой вирджинского кедрового масла и, при необходимости, кристаллизацией. Могут быть использованы и другие ЭМ.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке (в зависимости от сорта) до 50%. Ограничений IFRA нет.

3.29. Изолонгифоленол

5-Гидрокси-2,2,7,7-тетраметилтрицикло-[6,2,1,$0^{3,8}$]-3-уиденцен, Isolongifolenol, Picea alcohol (КНР). $C_{15}H_{24}O$; 220,36



Запах — древесный. Жидкость, смесь изомеров.

Промышленный продукт, вырабатываемый в КНР, содержит ~80% изолонгифоленола и имеет d_{25}^{25} 0,984–0,987; т. всп. 120°C.

Получение базируется на изомеризации лонгифолен – изолонгифолен под действием кислот или BF_3-эфирата и последующем введении в молекулу изолонгифолена кислородной функции. Исходный лонгифолен содержится во многих сортах терпентинового масла.

3.30. Санталол

5-(2,3-Диметилтрицикло-[2,2,1,$0^{2,6}$]-гепт-3-ил)-2-метил-2-пентенол, *alpha*-Santalol (Arc. 2818), *beta*-Santalol (Arc. 2819), Santalol (GIV, IFF). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

альфа—санталол

C.A. 77-42-9; 11031-45-1

Содержится в индийском и австралийском санталовых маслах.

Запах — богатый, санталового дерева, свободный от терпеновых нот. Жидкость. Смесь *альфа*— и *бета*—изомеров.

Продажные сорта обычно содержат 50–70% *альфа*—санталола и 20–40% *бета*—санталола.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (ацетил.)	0,970–0,974	1,505–1,508	>100
IFF, 1992	80 (ГЖХ, сумма изом.)	0,968–0,976	1,504–1,509	>100

Получают фракционированной вакуум-дистилляцией санталового масла.

Используют в дорогих парфюмерных композициях при дозировке до 15%. Ограничений IFRA иет.

3.31.–3.63. АЛЬДЕГИДЫ И КЕТОНЫ

3.31. Лимоненальдегид

3-(4-Метил-3-циклогексенил)-бутаналь, *beta*-(4-Methyl-3-cyclohexenyl)-butyraldehyde (Arc. 1974), Limonene aldehyde (Hüls). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

С.А. 37609-25-9

Запах — сильный лимонный со свежей цветочной нотой. Жидкость, т. пл. ниже -60°С.

Продажный продукт Hüls (1990) имеет d_4^{20} ~0,932, т. всп. 121°С.

Может быть получен гидроформилированием лимонена или дипентена.

Используется в некоторых парфюмерных композициях и отдушках.

3.32. Сафраналь

1,1,3-Триметил-2-формил-2,4-циклогексадиен, Dehydro-*beta*-cyclocitral (Arc. 869), Safranal (Roure, Firm.). $C_{10}H_{14}O$; 150,22

С.А. 116-26-7

Содержится в ЭМ шафрана.

Запах — характерный, шафрановый. Жидкость, т. кип. 227°С/1013 гПа, 70°С/1,3 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure	0,963–0,973	1,522–1,528	95
Firm., 1992	0,960–0,980	1,520–1,530	84

Известные способы синтеза мало пригодны для крупного промышленного производства.

Используется в ограниченном числе парфюмерных композиций и отдушек высших сортов.

3.33. Гомоциклоцитраль

2,6,6,-Триметил-1-циклогексенилацетальдегид, *Beta* homo cyclocitral (IFF). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

С.А. 472-66-2

Запах — сильный, свежий, морского бриза, травянистый. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1983) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{25}^{25} 0,935–0,948; n_D^{20} 1,480–1,486, т. всп. 73°С.

Может быть получен окислением *бета*-ионона перекисью водорода в присутствии раствора щелочи или надуксусной кислотой с последующей обработкой щелочью (Pittet A. O., Klaiber E. M., пат. США 3980708, 8.07.75–14.09.76, РЖХ 1977, 14Н44П; пат. США 3956393, 19.09.74–11.05.76, РЖХ 1977, 1Р667П).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

3.34. Кетональ

2-Метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклогексен-1-ил)-бутаналь, 9-формил-4(5)-мегастигмен, Cetonal (GIV). $C_{14}H_{24}O$; 208,34

С.А. 65405-84-7

Запах — сильный, древесный с нотой ириса. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 85% (оксим.) альдегида и имеет d_4^{20} 0,911–0,919, n_D^{20} 1,473–1,479, т. всп. 95°С.

Может быть получен из дигидроионона и этилового эфира хлоруксусной кислоты по реакции Дарзана подобно тому, как из ионона получают соответствующий ненасыщенный альдегид (Naegeli P., швейц. пат. 600882, 25.03.75–30.06.78, РЖХ 1979, 4Р544П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

3.35. Ментон

1-Метил-4-изопропилциклогексан-3-он, п-ментан-3-он, Menthone (Arc. 1843), Menthone racemic (GIV), l-Menthone (H.+R.).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

ментон

изоментон

C.A. 89-80-5; 491-07-6

(–)-Ментон и (+)-изоментон входят в состав многих ЭМ.

Запах ментона — мятный, освежающий, с легкой древесной нотой. В запахе изоментона ощущается дополнительная фруктовая нота. Оба изомера — жидкости при обычной температуре.

(–)-Ментон имеет т. кип. 210°С/1013 гПа; $[\alpha]_D$–28,5°; d_{20}^{20} 0,896; n_D^{20} 1,450.

Острая токсичность ментона по RIFM (1976): oral LD_{50} 2,18 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

(+)-Изоментон имеет т. кип. 212°С/1013 гПа; $[\alpha]_D$+95,0°; d_4^{20} 0,900; n_D^{20} 1,453.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (оксим.), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	Menthone rac.	98	0,890–0,894	1,448–1,452	77
H.+R., 1988	l-Menthone	95	0,888–0,895	1,449–1,453	83

(–)-Ментон может быть получен вакуум-ректификацией ЭМ *Mentha arvensis* после выделения из этого масла (–)-ментола

Дегидрирование ментола на медно-хромовых катализаторах обычно приводит к смеси ментон—изоментон (6:4). Ментон может быть

также получен каталитическим гидрированием тимола на палладиевых катализаторах (Кологривова Н. Е. и др., Журн. прикл хим 1975, **48**, № 7, 1636). Изомеризацию (–)-ментона в (+)-изоментон можно осуществить нагреванием с медными катализаторами или действием серной кислоты (частичная изомеризация).

Ментон используют в отдушках для зубных паст, товаров бытовой химии и некоторых косметических изделий. Ограничений IFRA нет.

3.36. Карвон

1,8-п-Ментадиен-6-он, 2-метил-5-изопропенил-2-циклогексенон, dextro-Carvone (Arc. 579), laevo-Carvone (Arc. 580), d- и l-Carvone (RIFM).

$C_{10}H_{14}O$; 150,22

C.A. 6485-40-1; 99-49-0; 2244-16-8

Карвон содержится в очень многих ЭМ. Значительные количества (+)-карвона содержат тминное (50–76%) и укропное (30–60%) ЭМ. (–)-Карвон входит в состав ЭМ кудрявой мяты *Mentha viridis* (55–60%) и садовой мяты *Mentha spicata* (55–75%).

Запах — мятно-тминный. Имеются различия в запахе энантиомеров (Russel G. F., Hills J. I., Science 1971, **172**, № 3987, 1043; РЖХ 1971, 23Ж541). Жидкость, т. кип. 230°С/1013 гПа; 91–92°С/13,3 гПа; (+)-карвон $[\alpha]_D^{20}$+69,1°; (–)-карвон $[\alpha]_D^{20}$–62,4°.

Острая токсичность по RIFM (1973 и 1978): oral LD_{50} 1,64 г/кг (крысы) для (+)- и (–)-форм, derm. LD_{50} 4 мл/кг (кролики) для (+)-формы.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Содержание кетона (оксим.), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Quest, 1989	L-Carvone	100	0,959	20/20	1,499	100
РФ, 1990	Карвон (из укропного ЭМ)	≥98	0,955–0,960	20/4	1,496–1,499	—

Промышленное производство карвона, объем которого составляет 1,5–2 тыс. тонн в год, примерно наполовину базируется на выделении

его из ЭМ: (-)-карвона — из ЭМ *Mentha spicata* или *Mentha cardiaca*, а (+)-карвона — из укропного масла (Clark G. S., Perfumer a. Flavorist, 1989, **14**, № 5-6, 35). Существует также крупное производство (-)-карвона путем нитрозохлорирования (+)-лимонена, дегидрохлорирования полученного нитрозохлорида и гидролиза оксима карвона (Derfer J. M. и др., пат США 3293301, 7.04.64-20.12.66, РЖХ 1968, 17Р474П; Rhotenberger O. S. и др., Journ. Chem. Educ. 1980, **57**, № 10, 741, РЖХ 1981, 9А51):

NOCl

Это производство сопряжено с образованием большого количества сильно загрязненных стоков и поэтому не имеет будущего.

Карвон используют при создании парфюмерных композиций, отдушек для зубных паст и косметических изделий, а также пищевых ароматических эссенций Ограничений IFRA нет.

3.37. Гербак

1-Ацетил-3,3-диметилциклогексан, Herbac (IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C.A. 25304-14-7

Запах — сильный, древесно-травянистый. Жидкость. Смесь изомеров, т. кип. 89°C/19 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного кетона и имеет d_4^{20} 0,895-0,903; n_D^{20} 1,450-1,455; т. всп. 70°C.

Может быть получен из дигидромирцена в виде смеси с триметилциклогептаноном по схеме:

HCOOH

(Hall J. B., Пат. США 3847975, 16.08.71-12.11.74, РЖХ 1975, 18Р448П; Journ. Org. Chem. 1972, **37**, № 6, 920, РЖХ 1972, 20Ж201).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.38. Артемон

1-Ацетил-3,3-диметил-1-циклогексен, Artemone (Roure). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

Запах — мятно-тминный. Жидкость. Острая токсичность, по данным Roure (1990), — oral LD_{50} > 4,6 г/кг.

Продажный продукт Roure (1990) имеет d_{20}^{20} 0,928-0,932; n_D^{20} 1,479-1,483; т. всп. 83°C.

Может быть получен перегруппировкой дегидролиналоола по Рупе под действием муравьиной кислоты при одновременной циклизации (Merkel D., Zeitschr. Chemie 1969, 9, № 2. 63, РЖХ, 1969, 19Ж495):

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.39. Неогаль

1-(5,5-Диметил-1-циклогексен-1-ил)-4-пентен-1-он, Neogal (Firm.), Dynascone 10 (Firm.). $C_{13}H_{20}O$; 192,30

C.A. 56973-85-4

Запах — очень сильный, гальбанума, ноты ананаса, гиацинта.

Запатентован Firm. (Schulte—Elte K. H. и др., заявка ФРГ 2502767, опубл. 31.07.75, Chem. Abst. 1975, **83**, 19770X).

Продажный продукт Dynascone 10 представляет собой 10%-ный раствор названного кетона в дипропиленгликоле. Этот раствор имеет d_{20}^{20} 1,008-1,016; n_D^{20} 1,444-1,448; т. всп. >100°C.

По сообщению Г. Олоффа (Ohloff G., Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verl., 1990, с. 15), изомерный кетон с положением 6 двойной связи в цикле имеет гораздо более слабый запах.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках — как правило, в виде растворов. Эффективен ввод очень малых концентраций. Ограничений IFRA нет.

3.40. Нееролион

6-Пропионил-1-п-ментен, п-ментенилэтилкетон, Nerone (Arc. 2321, GIV), 1-(p-Menthen-6-yl)-1-propanone (RIFM). $C_{13}H_{22}O$; 194,32

C.A. 31375-17-4

Запах — цитрусовый, свежей зелени, нота неролиевого масла. Жидкость, т. кип. 94–97°C/1 мм. Смесь *цис – транс*-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979) — derm. LD_{50} >10 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (ГЖХ)	0,911–0,916	1,468–1,474	> 100
РФ, 1972	94 (оксим.)	~0,915	1,472–1,475	—

Синтез неролиона состоит в селективном гидрировании дипентена или лимонена до карвоментена и в ацилировании последнего по Кондакову пропионовым ангидридом (Авакова Л. С., и др., Труды ВНИИСНДВ, вып. IX, 1971, с. 114):

H_2 → $(C_2H_5 \cdot CO)_2O$ →

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

3.41. *альфа*–Ионон

4-(2,6,6-Триметил-2-циклогексен-1-ил)-3-бутен-2-он, 4,7-мегастигмадиен-9-он, *Alpha* ionone (Arc. 1777, BBA, IFF, H.+R., BASF), Ionone (RIFM, H.+R., Quest), Irisone pure (GIV). $C_{13}H_{20}O$; 192,30

C.A. 127-41-3;
8013-90-9

Содержится в небольших количествах в некоторых ЭМ.

Запах — цветочный (фиалки), древесный с фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 121–122°C/13 гПа; 79°C/1,05 гПа; 65°C/0,1 гПа; P_{20} $1,35 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 31,8 дин/см; σ_{20} 13,1 спуаз. Обычно — *транс*-изомер.

Острая токсичность по RIFM (1975) — oral LD_{50} 4,6 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	*alpha* 100%	85α-ионона	0,928–0,932	25/25	1,496–1,501	>100
H.+R., 1988	pure 100%	60–70 α-ионона, 25–35 β-ионона	0,931–0,937	25/25	1,502–1,507	>100
GIV, 1987	Irisone pure	60–80 α-ионона, 10–40 β-ионона	0,931–0,938	20/4	1,502–1,507	>100
BASF, 1988	*alpha*–Ionone	90α-ионона	0,927–0,933	25/25	1,497–1,507	115
BBA, 1990	*alpha*-800	81α-ионона, 9β-ионона	~0,931	20/20	~1,502	110
BBA, 1990	*alpha*-700	70α-ионона, 20β-ионона	~0,936	20/20	~1,502	110
BBA, 1990	*alpha*-600	60α-ионона, 30β-ионона	~0,934	20/20	~1,506	110

Продолжение табл.

Изготовитель	Сорт	Содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Quest, 1989	Ionone	92-сумма, 65α-ионона	~0,932	20/20	~1,503	>100
IFF, 1992	*alpha*	65–85 α-ионона, 92-сумма	0,927–0,935	25/25	1,499–1,504	>100
IFF, 1992	100%	60–80 α-ионона, 92-сумма	0,929–0,937	25/25	1,501–1,506	>100
IFF, 1992	extra	60–75 α-ионона, 92-сумма	0,930–0,938	25/25	1,501–1,506	>100
РФ, 1990	Ионон	91-сумма	0,936–0,941	20/4	1,502–1,505	115

Традиционный способ промышленного получения ионона состоит в конденсации цитраля с ацетоном под действием щелочных агентов и в последующей циклизации полученного псевдоионона:

CHO → O → O

От условий циклизации зависит соотношение *альфа*– и *бета*-изомеров и парфюмерное качество ионона.

Псевдоионон является полупродуктом синтеза витаминов А и Е Объем его производства составляет несколько тысяч тонн в год, и ресурсов цитраля недостаточно, чтобы вырабатывать необходимые количества. В промышленности реализованы еще две схемы синтеза псевдоионона из дегидролиналоола:

а) с применением метилизопропенилового эфира (способ Гофман ля Рош, Saucy G., Marbet R., Helv. chim. acta 1967, 50, № 4, 1158, РЖХ 1968, 4Ж474)

OH OCH₃ → O → O

б) с ацетоуксусным эфиром по реакции Кэррола (способ BASF, Pommer H. и др, пат ФРГ 1286018, 4.02.67–23.12.70, РЖХ 1971, 14Р489П)

O O OCH₃ OH → O O O → O

При циклизации псевдоионона для получения смеси изомеров, обогащенной *альфа*-иононом, обычно применяют фосфорную кислоту. В РФ процесс ведут в толуоле при использовании небольших количеств фосфорной кислоты при 110°С за 10–30 мин. (Харшан М. А. и др., авт. свид. 695164, 30.12.77 — Б. И. 1986, № 6, РЖХ 1986, 24Р730П).

Альфа-ионон широко используют в парфюмериых композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.42. *бета*-Ионон

4-(2,6,6-Триметил-1-цикло-гексен-1-ил)-3-бутен-2-он, 5,7-мегастигмадиен-9-он, *beta*-Ionone (Arc. 1778, BASF), Jonone *beta* (GIV, IFF).

$C_{13}H_{20}O$; 192,30

С. А. 79–77–6; 14901–07–6

Содержится в некоторых эфирных маслах.

Запах — древесный с цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 134–135°С/14,6 гПа; 120°С/7 гПа; P_{20} $8,2 \cdot 10^{-3}$ гПа; γ_{20} 32,3 дин/см; σ_{20} 11,3 спуаз. Смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	Synthetic	97	0,940–0,944	1,519–1,522	>100
BASF, 1987	*beta*-Ionone	90	0,925–0,938	1,497–1,506	122
BASF, 1987	*beta*-Ionone R	98	0,940–0,947	1,516–1,522	122
IFF, 1992	Ionone *beta*	95	0,939–0,947	0,517–1 522	>100

В промышленности получают в количестве нескольких тысяч тонн в качестве полупродукта синтеза витамина А способом циклизации псевдоионона действием серной и других кислот. В РФ применяют способ непрерывной циклизации под воздействием смеси серной и уксусной кислот (Лебедев И. М. и др., авт. свид. 458540, 29.11.62–1.08.75, РЖХ 1976, 10Р500П).

В парфюмерных композициях и отдушках используется значительно реже, чем *альфа*-ионон, при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.43. Дигидро-*бета*-ионон

4-(2,6,6-Триметил-1-циклогексен-1-ил)-бутан-2-он, 5-мегастигмен-9-он, Dihydro-*beta*-ionone (Arc. 949, BASF) — $C_{13}H_{22}O$; 194,32

С. А. 17283-81-7

Содержится в абсолютном масле *Osmanthus fragrans*, а также в землянике и некоторых фруктах.

Запах — приятный цветочный с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 236°C/1013 гПа, 100°C/1 гПа.

Продажный продукт BASF (1988) содержит не менее 98% (ГЖХ) дигидро-*бета*-ионона и имеет d_{25}^{25} 0,931–0,933; n_D^{20} 1,483–1,485; т. всп. 127°C.

Может быть получен селективным каталитическим гидрированием *бета*-ионона (Васильев А. А. и др., Хим.-фарм. журн. 1991, **25**, № 1, с. 66, РЖХ, 1991, 12Е149).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.44. Метилионон

5-(2,6,6-Триметил-2-циклогексен-1-ил)-4-пентен-3-он, 10-метил-4,7-мегастигмадиен-9-он, *alpha*-n-Methyl ionone (Arc. 2085), Methyl ionone (RIFM, Quest), Raldeine A (GIV), Methyl ionone *alpha* extra (IFF), *Alpha* methylionone 400 (BBA), Iraldein 100% (H.+R.). — $C_{14}H_{22}O$; 206,33

С. А. 127-42-4; 7779-30-8

Запах — древесно-цветочный с нотой фиалки. Жидкость, т. кип. 97°C/3,5 гПа; P_{20} $7,3 \cdot 10^{-3}$ гПа; γ_{20} 34,5 дин/см; σ_{20} 11,3 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажные продукты обычно представляют собой смеси изомеров: α-норм.-, α-изо-, β-норм.-, β-изо-метилионона.

Коммерческие продукты

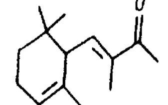
Изготовитель	ГЖХ-анализ, %		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
	Всего	α-норм.				
GIV, 1973	90	—	0,928–0,934	20/4	1,499–1,503	—
IFF, 1992	—	60–80	0,924–0,932	20/4	1,497–1,502	>100
Quest, 1989	92	>55	0,925–0,930	20/20	1,501–1,504	90
BBA, 1990	96	40	~0,931	20/20	~1,504	107
РФ, 1990	93	—	0,933–0,936	20/4	1,501–1,504	122
H.+R., 1988	95 (оксим.)	—	0,924–0,930	25/25	1,498–1,502	136

Получают конденсацией цитраля с метилэтилкетоном в присутствии едкого натра и последующей циклизацией образовавшегося псевдометилионона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.45. Иралия

3-Метил-4-(2,6,6-триметил-2-циклогексен-1-ил)-3-бутен-2-он, 8-метил-4,7-мегастигмадиен-9-он, *альфа*-изометилионон, Iralia (Firm.), Isoraldeine, Cetone *alpha* (GIV), Iraldein *gamma* (H.+R.), *Gamma*-methylionone (IFF, BBA), *Alpha* daphnone (BBA). — $C_{14}H_{22}O$; 206,33



С. А. 127-51-5

Запах — ириса и фиалки с пудровой и древесной нотами. Жидкость. т. кип. 130–131°С/13 гПа; P_{20}8,2 · 10^{-3} гПа. Смесь изомеров.

Токсичность — см. метилионон.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	ГЖХ-анализ, %		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
		Всего	α-изо				
Firm., 1979/92	Iralia	92 (оксим)	—	0,927–0,934	20/20	1,498–1,503	>100
GIV, 1984	Cetone *alpha*	98 (оксим)	90	0 929–0,932	20/4	1,499–1,502	>100
GIV, 1984	Isoraldein	95 (оксим.)	85–90	0,929–0,932	20/4	1,499–1,502	120
GIV, 1984	Isoraldein 70	95 (оксим.)	>60	0,929–0,932	20/4	1,498–1,502	>100
H.+R., 1988	*gamma*	95 (оксим.)	—	0,925–0,933	25/25	1,499–1,502	>100
H.+R., 1988	pure	95 (оксим.)	—	0,927–0,931	25/25	1,498–1,501	129
IFF, 1992	*gammaA*	95	50–70	0,927–0,935	20/4	1,498–1,503	>100
IFF, 1992	*gamma coeur*	95	80	0,927–0,935	20/4	1,498–1,503	>100
IFF, 1992	*gamma* pure	95	65–85	0,927–0,935	20/4	1,498–1,503	>100
Quest, 1989	*alpha* iso	92	53–58	0,925–0,930	20/20	1,502	>100
BBA, 1990	α-daphnone	96	90	~0,932	20/20	~1,501	118
BBA, 1990	*gamma* 600	95	57	~0,929	20/20	~1,502	118
РФ, 1990	В. сорт	—	—	0,932–0,936	20/4	1,502–1,504	—

Традиционный способ промышленного получения иралии состоит в конденсации цитраля с метилэтилкетоном под действием метилата натрия и в циклизации полученной псевдоиралии при реакции с фосфорной или серной кислотой:

CHO
O
O
O

Возможно также проведение конденсации в среде метанола под действием небольших количеств едких щелочей (Gradeff P. S., пат. США 3840601, 7.02.72–8.10.74, РЖХ 1975, 16Р392П).

В РФ используется способ конденсации под действием сульфита натрия. Детальное исследование этого способа показало, что в данном случае образуется сульфонат цитраля, который вступает в реакцию с метилэтилкетоном с преимущественным образованием продукта конденсации по метиленовой группе:

CHO
O
SO_3Na
O

(Г. Г. Коломеер и др., авт. свид. 899528, 10.06.80 — Б. И. 1982, № 3, РЖХ 1983, 13Р477П; Масло-жировая пром-сть, 1983, № 8, с. 22).

Циклизацию псевдоиралии в РФ успешно осуществляют действием небольшого количества фосфорной кислоты при повышенной температуре за короткое время (120°С, 30 мин) без применения растворителя (Крон А. А. и др., авт. свид. 792827, 11.05.79 — Б. И. 1986, № 16, РЖХ, 1986 , 24Р731П).

Мировое производство иралии составляет более 800 т в год.

Этот продукт с успехом применяется во многих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

3.46. *бета*-Изометилионон

3-Метил-4-(2,6,6-триметил-1-циклогексен-1-ил)-3-бутен-2-он, 8-метил-5,7-мегастигмадиен-9-он, *beta*-iso-Methyl ionone (Arc. 2088), Iraldein *delta* (H.+R.).

$C_{14}H_{22}O$; 206,33

O

С. А. 79-89-0

Запах — цветочный (фиалки) с ирисовой и древесной нотами. Жидкость, т. кип. 94°С/4 гПа. Смесь изомеров.

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 95% (оксим.) изомерных кетонов и имеет d_{25}^{25} 0,932–0,937; n_D^{20} 1,507–1,513; т. всп. 134°С.

Может быть получен фракционированной дистилляцией смеси изометилиононов, образующейся при циклизации псевдоизометилионона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет

3.47. Аллилионон

1-(2,6,6-Триметил-2-циклогексен-1-ил)-1,6-гептадиен-3-он, 10-аллил-4,7-метастигмадиен-9-он, Allyl ionone (Arc. 86, RIFM), Ceton V (GIV), Delton (Roure), Hexalon (IFF).

$C_{16}H_{24}O$; 232,37

C. A. 79-78-7

Запах — цветочно-фруктовый с древесным оттенком запаха. Жидкость, т. кип. 102–104°C/0,2 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1973) — derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	92 (оксим.)	0,927–0,932	20/4	1,503–1,507	>100
Roure	—	~0,931	20/20	~1,504	138
IFF, 1992	90 (ГЖХ, сумма 3-х изомеров)	0,927–0,935	20/4	1,502–1,509	>100

Может быть получен конденсацией аллилацетона с цитралем и последующей циклизацией. Другой способ состоит в получении диметилкеталя ионона и в его взаимодействии с аллиловым спиртом, которое сопровождается перегруппировкой Кляйзена (Sprecker M. A. и др., пат. США 4576741, 14.11.84–18.03.86, РЖХ 1986, 23Р709П).

Используют в парфюмерных композициях при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях Ограничений IFRA нет.

3.48. Ирон

Альфа и бета-формы: 4-[2,5,6,6-тетраметил-2(1)-циклогексен-1-ил]-3-бутен-2-он, 2-метил-4(5), 7-мегастигмадиен-9-он, *гамма*-форма: 4-(2-метилен-5,6,6-триметилциклогексан-1-ил)-3-бутен-2-он, 2-метил-7,13-мегастигмадиен-9-он, *alpha*-Irone (Arc. 1784), *beta*-Irone (Arc. 1785), *gamma*-Irone (Arc. 1786), Irone *alpha* (GIV).

$C_{14}H_{22}O$; 206,33

C. A. 79-69-6

Содержится в ЭМ, вырабатываемом из корней ириса (*Iris pallida*). Изомерный состав природного ирона (см. Ohloff G., Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verlag, 1990, 162) представлен следующими структурно-пространственными изомерами: I. (+)-*цис* – *альфа*-ирон (39%), II. (–)–*транс* – *альфа*-ирон (16%), III. *бета*-ирон (2%), IV. *цис* – *гамма*-ирон (43%):

Наиболее приятный и чистый запах ирисового направления имеет изомер II.

Продажный синтетический ирон GIV (1984) содержит не менее 97% (оксим.) кетонов, причем доля *альфа*-изомеров составляет около 93% (ГЖХ).

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики). Продукт имеет d_4^{20} 0,931–0,937, n_D^{20} 1,500–1,503, т. всп. >100°C.

По всей вероятности, его получают по принятым на GIV методам, исходя из 5,6-диметил-5-гептен-2-она.

В РФ в 1957 г. был осуществлен синтез ирона на опытной установке (В. Н. Белов и др., Журн общ. хим., 1957, 27, № 5, с. 1384)

30-5414

путем гидрохлорирования 2,3-диметилбутадиена и последовательных превращений полученного гидрохлорида в 6-метилгеранилхлорид, 6-метилцитраль, псевдоирон, ирон:

Несколько позже производство ирона по этой схеме было передано Опытному заводу института химии Эстонской АН.

Изомерный состав ирона, вырабатываемого этим заводом, включает: I. 30,5–44,7%, II. 40,7–55,2%, III. 4,6–7,9% (Сакс Т. и др., Изв. АН Эст. ССР, Химия, 1978, **27**, № 4, с. 230, РЖХ 1979, 6Е31).

Использование ирона в парфюмерных композициях ограничивается его очень высокой ценой.

3.49. *альфа*-Дамаскон

1-(2,6,6-Триметил-2-циклогексен-1-ил)-2-бутен-1-он, 4,8-мегастигмадиен-7-он, Damascone *alpha* (Firm.) $C_{13}H_{20}O$; 192,30

С. А. 43052-87-5

Содержится в эфирном масле чая.

Запах — сильный проникающий, цветочно-фруктовый, ноты яблока, черной смородины, розы, стойкий. Жидкость, т. кип. 90–100°C/0,13 гПа, смесь (Z)- и (E)-изомеров.

Продажный продукт Firm. (1983, 1992) содержит не менее 90% (ГЖХ, 2 изомера) *альфа*-дамаскона и имеет d_{20}^{20} 0,932–0,938; n_d^{20} 1,493–1,499; т. всп. > 100°C.

Описано много вариантов синтеза *альфа*-дамаскона, а также *бета*-дамаскона и дамасценона (см. Ohloff G., Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verl., 1990, с. 120), однако все они довольно трудны для производственных условий. В первых публикациях рассматривались пути получения *альфа*-дамаскона из *альфа*-циклоцитраля. В последующем были изучены варианты, базирующиеся на использовании *альфа*-ионона, дегидролиналоола и других видов сырья.

Объем производства *альфа*-дамаскона, вероятно, пока не превышает 10 т в год. Продукт очень дорог.

Использование в парфюмерных композициях даже в очень малых концентрациях весьма эффективно. Ограничений IFRA нет.

3.50. *бета*-Дамаскон

1-(2,6,6-Триметил-1-циклогексен-1-ил)-2-бутен-1-он, 5,8-мегастигмадиен-7-он, Damascone *beta* (Firm.). $C_{13}H_{20}O$; 192,30

С. А. 35044-68-9

Содержится в микроколичестве в розовом ЭМ.

Запах — очень сильный, фруктово-цветочный, ноты черной смородины, розы, табака. Порог обоняния $0{,}9 \cdot 10^{-8}$%. Жидкость, т. кип. 68–70°C/0,03 гПа, смесь (Z)- и (E)-изомеров.

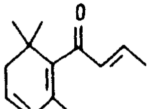
Продажный продукт Firm. (1983, 1992) содержит не менее 88% (ГЖХ, основной изомер) *бета*-дамаскона и имеет d_{20}^{20} 0,934–0,942; n_D^{20} 1,496–1,501; т. всп. >100°C.

Методы синтеза трудноосуществимы в крупном промышленном масштабе. Интенсивный запах и малая величина порога обоняния обеспечивают весьма эффективное действие при введении в парфюмерные композиции.

Наличие в розовом масле *бета*-дамаскона ($0{,}3 \cdot 10^{-3}$%) оказывает существенное влияние на запах этого масла (Ohloff G., Demole E., Journal Chromatogr. 1987, **406**, с. 181).

3.51. Дамасценон

1-(2,6,6-Триметил-1,3-циклогексадиен-1-ил)-2-бутен-1-он, 3,5,8-мегастигматриен-7-он, Damascenone (Firm.). $C_{13}H_{18}O$; 190,28



С. А. 23696-85-7

Найден в ЭМ болгарской розы (0,05%).

Запах — очень сильный, цветочно-фруктовый, ноты розы, сливы, грейпфрута, малины. Жидкость, т. кип. 60°C/0,013 гПа.

Продажный продукт Firm. (1983, 1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_{20}^{20} 0,946–0,952; n_D^{20} 1,508–1,514; т. всп. >100°C.

Открытие и синтез дамасценона (Demole E. и др., Helv. chim. acta, 1970, **53**, № 3, с. 541, РЖХ, 1970, 20Ж697) были первым шагом в

исследованиях веществ этой группы, включающей *альфа* - и *бета*-дамасконы и отличающейся малыми порогами обоняния и существенным влиянием на запах композиции при очень небольших концентрациях.

Дамасценон используется в парфюмерных композициях высших сортов. Продукт очень дорог. Ограничений IFRA нет.

3.52. Изодамаскон

1-(2,4,4-Триметил-2-циклогексен-1-ил)-2-бутен-1-он, 2,4,4-триметил-1-кротоноил-2-циклогексен, Isodamascone (Dragoco).

$C_{13}H_{20}O$; 192,30

Запах — сильный, проникающий, фруктово-цветочный. Жидкость. Смесь изомеров. Т. кип. 80–90°C/4 гПа.

Продажный продукт Dragoco (1989) содержит не менее 85% (ГЖХ) суммы изомеров названного кетона и имеет d_{20}^{20} 0,921–0,931; n_D^{20} 1,487–1,497; т.всп. >110°C.

Может быть получен по реакции Кондакова действием ангидрида кротоновой кислоты на 1,3,3-триметил-6-циклогексен (*альфа*-циклогераниолен):

[$ZnCl_2$]

(Klein E., пат ФРГ 2120413, 26.04.71–9.04.81, РЖХ 1982, 12Р449П).

Используют в парфюмерных композициях при дозировке 0,05–1%. По интенсивности запаха уступает *альфа*- и *бета*- дамасконам. Ограничений IFRA нет.

3.53. *дельта*-Дамаскон

1-(2,6,6-Триметил-3-циклогексен-1-ил-)-2-бутен-1-он, 3,8-мегастигмадиен-7-он, *Delta* damascone (IFF).

$C_{13}H_{20}O$; 192,30

С. А. 57378-68-4

Запах — черной смородины, фруктов. Жидкость, т. кип. 87,5–89°C/4 гПа. Смесь (Z)- и (E)-изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров *дельта*-дамаскона и имеет d_4^{20} 0,926–0,934; n_D^{20} 1,489–1,494; т. всп. >100°C.

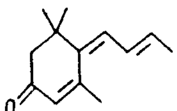
Может быть получен катализируемой $AlCl_3$ диеновой конденсацией пиперилена с мезитил-оксидом, последующим взаимодействием с этилмагнийбромидом и уксусным альдегидом и далее — дегидратацией (Mookherjee B. D. и др., пат. США 4198309, 23.03.79–15.04.80, РЖХ 1981, 2Р436П; пат. США 4334098, 23.03.79–8.06.82, РЖХ 1983, 10Р521П):

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях при дозировке до 0,1%. Ограничений IFRA нет.

3.54. Табанон

3,5,5-Триметил-4-бутенилиден-2-циклогексен-1-он, 4,6,8-мегастигматриен-3-он, Tabanon (Dragoco).

$C_{13}H_{18}O$; 190,28



Найден в составе табака "Burley".

Запах — сладкий, подобный запаху табака, сухих фруктов, стойкий Жидкость, т. кип 105°C/1 гПа. Смесь названного соединения с изомерными кетонами

Продажный продукт Dragoco (1990) содержит не менее 75% (оксим) кетонов и имеет d_4^{20} 0,985–1,005; n_D^{20} 1,536–1,556

Может быть получен пиролизом соответствующих гидрокси- или ацетокси – соединений (Brunke E J., Tumbrink L., заявка ФРГ 3516931, 10 05 85–13 11.86, РЖХ, 1987, 17Р519П).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках для табака. Ограничений IFRA нет.

3.55. Камфора

Камфан-2-он, 1,7,7-триметилбицикло-[2,2,1]-гептан-2-он, dextro-Camphor (Arc. 565), Camphor (RIFM). $C_{10}H_{16}O$; 152,24

C.A. 464-49-3; 21368-68-3

Содержится в очень многих ЭМ, в том числе в ЭМ камфарного дерева (*Cinnamonum camphora*), сассафраса и др., чаще всего в виде (+)-формы.

Запах — характерный камфарный, слегка мятный. Кристаллы, т. пл. 179–180°C; т. кип. 204°C/1013 гПа.

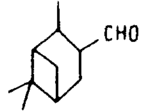
Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии с требованиями Госфармакопеи СССР (X, 1968) (+)-камфора из камфарного масла должна иметь т. пл. 174–180°C, $[\alpha]_D^{20}$+ 41÷ + 44°, (–)-камфора, вырабатываемая из пихтового масла, $[\alpha]_D^{20}$ –39 ÷ –44°, а (±)-камфора, синтезируемая по схеме камфен-борнеол-камфора, т. пл. 171–178°C.

Используется в небольших дозах в некоторых парфюмерных композициях, а также в отдушках для товаров бытовой химии и промышленного назначения.

3.56. Формилпинан

3-Формилпинан, 2,6,6-триметилбицикло[2,2,1]-гептан-3-карбальдегид, Formylpinan R (BASF). $C_{11}H_{18}O$, 166,26



Запах — сильный, камфарно-эвкалиптовый с нотами зелени, шалфея, стойкий. Жидкость, т. кип. 59°C/1 гПа.

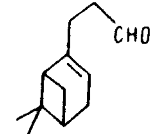
Продажный продукт BASF (1988) содержит не менее 95% (ГЖХ) формилпинана и имеет d_4^{20} 0,952–0,955; n_D^{20} 1,476–1,478; т. всп. 81°C

Может быть получен гидроформилированием *альфа*-пинена действием окиси углерода и водорода в присутствии специальных катализаторов.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.57. Пиноацетальдегид

3-(6,6-Диметилбицикло [3,1,1]-2-гептен-2-ил)-пропаналь, Pinoacetaldehyde (IFF). $C_{12}H_{18}O$; 178,27



C. A. 33885-51-7

Запах — сильный, свежий, альдегидно-сосновый. Жидкость, т. кип. 88°C/4,3 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,952–0,958; n_D^{20} 1,481–1,486; т всп 89°C.

Получают взаимодействием пинокарвеола с винилэтиловым эфиром при катализе фосфорной кислотой (автоклав, 150–155°C) (Hall J B , пат. США 3636113, 4.11.69–18.01.72, РЖХ, 1972, 18Р382П):

Пинокарвеол может быть получен взаимодействием 2,3-эпоксипинана с изопропилатом алюминия (Scheidl F., заявка ФРГ 3143227, 31.10.81–11.05.83, РЖХ, 1984, 10Н90П).

Пиноацетальдегид используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

3.58. Пиноизомасляный альдегид

2,2-Диметилпиноацетальдегид, 2,2-диметил-3-(6,6-диметилбицикло [3,1,1]-2-гептен-2-ил)-пропаналь, $C_{14}H_{22}O$; 206,33

Запах — свежий цветочный с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 120–121°С/14 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в КНР (1990), содержит не менее 95% названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 0,940–0,942; n_D^{20} 1,480–1,482; т. всп. >93°С.

Получают из пинокарвеола и изомасляного альдегида посредством Кляйзеновской перегруппировки промежуточного образующегося винилового эфира:

(Окуда О. и др., японск. пат. 52-35668, 22.12.73–10.09.77, РЖХ, 1978, 15Н109П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

3.59. Ацетилкарен

4-Ацетил-2-карен, Acetyl carene (RIFM), Atteron (Miltitz), Dragon (Dragoco), Carenco (IFF). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

C. A. 3608-11-5

Запах — древесно-травянистый. Жидкость, т. кип. 108–110°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп. °С
Miltitz, 1991	95 (оксим.)	0,950–0,960	20/20	1,487–1,494	93
Dragoco, 1990	99 (оксим.)	0,948–0,953	20/4	1,485–1,490	85
IFF, 1992	80 (ГЖХ)	0,946–0,956	25/25	1,484–1,490	77

Может быть получен ацетилированием 3-карена по Кондакову (Mühlstädt M., Richter P., Chem. Ber. 1967, 100, № 6, 1892, РЖХ, 1968, 6Ж444).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

3.60. Цедралон

9-Оксоцедран, 2,2,6,10-тетраметилтрицикло [5,3,1,$0^{3,7}$]ундекан-9-он, Cedralon (Dragoco), Cedrone S (IFF). $C_{15}H_{24}O$; 220 36

C. A. 68648-34-0

Запах — тонкий древесный, нота кедра. Жидкость, т. кип. 124–126°C/0,3 гПа; n_D^{20} 1,503.

Продажный продукт Dragoco (1982) содержит ~85% (ГЖХ, основной пик) цедралона и имеет d_4^{20} 0,995–1,005; n_D^{20} 1,497–1,504; т. всп. >110°C.

Может быть получен окислением *альфа*-цедрена перекисью водорода в присутствии этилформиата (Traas P. C., Boelens H., англ. пат. 1434035, 20.07.72–28.04.76, РЖХ, 1976, 24Р481П).

IFF (1992) вырабатывает смесь, которая содержит до 35% цедрола и 53–76% цедралона, под названием Cedrone S. Этот продукт имеет d_4^{20} 0,996–1,007; n_D^{20} 1,503–1,509; т. всп. >100°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.61. Ацетилцедрен

Смесь 2,2,6,10-тетраметил-9-ацетилтрицикло [5,3,1,$0^{3,7}$]-9-ундецена (I) и 2,2,8-триметил-5-ацетилтрицикло [6,2,2,$0^{1,6}$]-5-додецена (II), Acetyl cedrene (RIFM), Cetone KV (Roure), Vertofix coeur (IFF), Methyl cedrylone (Quest), Woodyflor (TAK), Lignofix (Dragoco).

$C_{17}H_{26}O$; 246,40

I

II

C. A. 32388-55-9

Запах — древесный с амбровой нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 105–110°C/0,8 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 5,2 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Состав (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Roure	–	1,020–1,030	20/20	1,515–1,520	94
IFF, 1992	65-сумма изомеров, 40-кетон I	1,001–1,011	20/4	1,517–1,524	>100
Quest, 1989	–	0,998–1,004	20/20	1,515–1,519	>100
TAK, 1987	55-кетоны I и II	0,990—1,090	25/25	~1,510	150
Dragoco, 1990	–	0,997–1,008	20/4	1,512–1,520	>110
КНР, 1990	90-смесь продуктов ацилирования	0,996–1,010	20/20	1,517–1,521	171

Кетон I, который может быть получен ацилированием цедрена по Кондакову (В. Н. Белов, Т. А. Рудольфи. Журнал общей химии; сборник статей по общей химии, 1953, т. 1, с. 266; Труды ВНИИСНДВ, вып. 1, 1952, с. 86), обладает слабым кедровым запахом.

При ацетилировании углеводородной фракции кедрового масла, которая обычно содержит 40–50% *альфа*-цедрена и 40–50% туйопсена, действием уксусного ангидрида и полифосфорной кислоты получают "ацетилцедрен" (смесь I и II). Одновременно с ацетилированием туйопсена происходит его изомеризация с образованием кетона II, обладающего более сильным и характерным запахом по сравнению с кетоном I (Daeniker H. U. и др., Jorn. Org. Chem. 1972, **37**, № 1, 6, РЖХ, 1972, 10Ж556; Kitchens G. C. и др., пат. США 3678119, 18.01.71–18.07.72, РЖХ, 1973, 8Р479П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.62. Изолонгифоланон

2,2,7,7-Тетраметилтрицикло-[6,2,1,$0^{3,8}$]-ундекан-4-он, Isolongifolanone (RIFM, Quest), Piconia (IFF), Valanone B (BBA), Timberone (PFW).

$C_{15}H_{24}O$; 220,36

C. A. 23787-90-8

Запах — древесный с нотами пачули, ветиверии, стойкий. Жидкость, т. кип. 113–117°C/2,7 гПа, смесь изомеров.

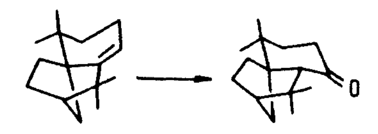
Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	80 (2 изомера)	0,998–1,006	20/4	1,498–1,503	>100
Quest, 1989	65 (основной изомер)	1,003–1,010	20/20	1,497–1,502	106
BBA, 1990	90 (сумма изомеров)	1,002–1,006	20/20	1,500–1,503	>100
PFW, 1983	–	1,000–1,010	20/20	1,500–1,504	>100
КНР, 1990	60 (основной изомер)	~1,000	25/25	~1,500	120

Может быть получен изомеризацией лонгифолена в изолонгифолен и последующим окислением действием 50%-ной H_2O_2 и муравьиной

кислоты (Hall J. B., пат США 3718698, 24.11.69–27.02.73, РЖХ, 1973, 24Р526П) или 30%-ной H_2O_2 и этилформиата (Traas P., Boelens H., англ. пат. 1434035, 20.07.72–28.04.76, РЖХ, 1976, 24Р481П):



Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

3.63. Амбриаль

Смесь 2,6,6,10-тетраметил-12-метилен-11-формилтрицикло-[8,4,0,$0^{2,7}$]-тетрадекана и 3-метил-5 (1,3,7,-тетраметил-бицикло[4,4,0]-2-децен-2-ил)-2-пентеналя, Ambrial (РФ). $C_{20}H_{32}O$; 288,48

Запах — амбровый, мягкий. Жидкость, смесь изомеров, т. кип. 160–190°С/6,7 гПа.

Продукт, вырабатываемый в РФ, содержит не менее 75% (оксим.) смеси альдегидов и имеет n_D^{20} 1,512–1,520; d_4^{20} 0,980–0,990. Его получают окислением склареола хромовой смесью в растворе толуол-уксусная кислота и последующей дегидратацией образовавшегося склареолового альдегида в процессе вакуумной перегонки (200°С, 7–10 гПа) (В. Е. Сибирцева и др., Труды ВНИИСНДВ, 1961, вып. V, с. 9; Журн. общ. хим. 1968, **38**(С), № 4, с. 766).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

3.64–3.96. СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ

3.64. Метил-3,3-диметилциклогексилкарбинилформиат

Формиат 3,3-диметилциклогекс-1-ил-1-этанола, Aphermate, CP Formate (IFF). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

С. А. 25225-08-5

Запах — свежий, древесно-травянистый с фруктовой нотой. Жидкость. Смесь формиатов и спиртов. Т. кип. 70°С/4 гПа; 55°С/1,3 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 70% (ГЖХ) названного формиата и имеет d_4^{20} 0,936–0,944; n_D^{20} 1,445–1,453; т. всп. 74°С.

Может быть получен действием муравьиной кислоты на дигидромирцен:

(Ansari H. R., Jaggers B. G., англ. пат. 1254198, 1.04.70–17.11.71, РЖХ, 1972, 7Р545П; Hall J. B., пат США 3847975, 16.08.71–12.11.74, РЖХ, 1975, 18Р448П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.65. Метил-3,3-диметилциклогексилкарбинилацетат

3,3-Диметил-1(1-ацетоксиэтил)-циклогексан, Rosamusk (IFF). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 25225-10-9

Запах — розы, мускуса с фруктовой нотой. Жидкость. Смесь изомеров. Т. кип. 81°С/4 гПа.

Острая токсичность, по данным IFF (1992), — oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 80% (ГЖХ) названного ацетата и имеет d_4^{20} 0,923–0,933; n_D^{20} 1,445–1,451; т. всп. 88°С.

Получают из дигидромирцена действием смеси уксусной и серной кислот или уксусной кислоты и BF_3-эфирата. (Ansari H. R., Jaggers B. G., англ. пат. 1254198, 1.04.70–17.11.71, РЖХ, 1972, 7Р545П; Hall J. B., пат США 3847975, 16.08.71–12.11.74, РЖХ, 1975, 18Р448П):

$CH_3.COOH$

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.66. Метилциклогераниат

Метиловый эфир циклогераниевой кислоты, метил-(2,6,6-триметил-2-циклогексен-1-ил)-карбоксилат, Methyl cyclogeranate (Firm.).	**$C_{11}H_{18}O_2$; 182,26**
C. A. 28043-10-9	OCH_3

Запах — травянистый, цветочно-фруктовый, ноты ромашки, базилика, розмарина. Жидкость, т. кип. 73°С/2,7 гПа.

Острая токсичность, по данным Firm (1984), — oral LD_{50} 4,1 г/кг (крысы).

Продажный продукт Firm (1984, 1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) метилциклогераниата и имеет d_{20}^{20} 0,962–0,968; n_D^{20} 1,461–1,465; т. всп. 77°С.

Может быть получен путем циклизации гераниевой кислоты под действием BF_3 или других кислых реагентов (В. А. Смит, В. Ф. Кучеров. Успехи химии, 1959, **28**, № 3, с. 272) и последующей этерификации метанолом или циклизацией метилового эфира гераниевой кислоты.

Используют в парфюмерных композициях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

3.67. Этилсафранат

Этил-(2,6,6-триметил-1,3-циклогексадиен-1-ил)-карбоксилат, Ethyl safranate (Quest).	**$C_{12}H_{18}O_2$; 194,27**
C. A. 35044-57-6; 35044-58-7; 35044-59-8	

Запах — сильный, фруктовый с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 70–76°С/6,7 гПа; смесь *альфа-*, *бета-* и *гамма*-изомеров (соотношение 2:6:2).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 90% (ГЖХ) этилсафраната и имеет d_{20}^{20} 0,962–0,972; n_D^{20} 1,474–1,480; т. всп. 88°С.

Может быть получен взаимодействием ацетоуксусного эфира с мезитилоксидом и последующими восстановлением и дегидратацией (Wille H. J. и др., англ. пат. 1456152, 22.02.74–17.11.76, РЖХ, 1977, 14Р530П):

OR OR OR OR HO

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

3.68. Гивескон

Смесь этил-(2-этил-6,6-диметил-2-циклогексен-1-ил)-карбоксилата и этил-(2,3,6,6-тетраметил-2-циклогексен-1-ил)-карбоксилата, Givescone (GIV).	**$C_{13}H_{22}O_2$; 210,32**
	C. A. 57934-97-1; 77851-97-1

Запах розы, фруктово-древесный, пряный. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы изомерных сложных эфиров и имеет d_4^{20} 0,941–0,946; n_D^{20} 1,460–1,464; т. всп. 91°С.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.69. Дигидрокарвилацетат

8-п-Ментен-2-илацетат, Dihydro carvylacetate (Arc. 928, RIFM, IFF), Carhydrine (IFF). $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 20777-39-3

Содержится в некоторых разновидностях мятных ЭМ. Запах — травянисто-мятный. Жидкость, т. кип. 232-234°C/1013 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) смеси изомеров, в том числе 70-90% дигидрокарвилацетата, и имеет d_4^{20} 0,942-0,950; n_D^{20} 1,458-1,463; т. всп. >100°C.

Может быть получен ацетилированием дигидрокарвеола уксусным ангидридом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

3.70. Ментилацетат

3-Ацетокси-п-ментан, 1-изопропил-2-ацетокси-4-метилциклогексан, Menthyl acetate (Arc. 1845, 1846, RIFM, H.+R.). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 16409-45-3

(−)-Ментилацетат содержится во многих сортах мятных ЭМ.

Запах (−)-ментилацетата мятно-освежающий, травянистый, холодящий. Для (±)-формы отмечено, что запах менее резкий со слабой древесной нотой. Жидкость, т. кип. 227°C/1013 гПа; 116°C/30 гПа; $P_{20}7,0 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976) для (±)- и (−)-форм: oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	$[\alpha]_D^{20}$	Миним. содерж. (омыл.), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	(−)	−70°+−75°	98	0,922-0,927	1,444-1,448	92
H.+R., 1988	(±)	+1°+−1°	98	0,922-0,925	1,445-1,450	96
РФ, 1990	(±)	-	98	~0,924	1,446-1,448	93

Получают ацетилированием ментола уксусным ангидридом. При использовании синтетического (±)-ментола возможно наличие примеси (±)-изоментола, который дает (±)-изоментилацетат.

В парфюмерных композициях применяют в ограниченном количестве. Используют главным образом при создании композиций искусственного мятного масла и отдушек для зубных паст. Ограничений IFRA нет.

3.71. Ментиллактат

Ментил-2-гидроксипропионат, Frescolat (H.+R.) $C_{13}H_{24}O_3$; 228,33

С. А. 59259-38-0

Запах — мягкий мятный с нотами табака, ромашки. Твердая масса.

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 98% (омыл.) сложного эфира и имеет т. заст. ⩾40°C; $[\alpha]_D$ — 74°; т. всп. 128°C.

Может использоваться в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.72. Терпинилацетат

альфа-Терпинилацетат, 1-п-ментен-8-илацетат, Terpinyl acetate (Arc. 2883, RIFM, GIV, BBA, H.+R., IFF) $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

C. A. 80-26-2; 10198-23-9

Содержится в ЭМ очень многих видов растений — хвойных, цитрусовых, травянистых.

Запах — цветочно-травянистый, иоты бергамота, сосны, лаванды. Жидкость, т. кип. 220°C/1013 гПа; 140°C/53 гПа; 87–88°C/4 гПа; P_{20} 2,9·10^{-2} гПа; γ_{20} 32,3 дин/см; σ_{20} 6,5 спуаз. Обычно содержит примеси изомерных соединений.

Острая токсичность по RIFM (1974) — oral LD_{50} 5,08 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	extra	97 (омыл.)	0,952–0,960	25/25	1,464–1,466	100
BBA, 1990	extra	98 (ГЖХ)	~0,959	20/20	~1,467	>100
H.+R., 1988	–	98 (омыл.)	0,957–0,959	25/25	1,464–1,466	100
РФ, 1990	Экстра	99 (омыл.)	0,959–0,964	20/4	1,464–1,466	95
IFF,1992	–	95 (ГЖХ)	0,954–0,962	25/25	1,463–1,467	91

Промышленный способ получения состоит в ацетилировании терпинеола уксусным ангидридом при температуре 26–28°C, катализатор — серная кислота.

Используется в парфюмерных композициях и в больших количествах — в отдушках различного назначения при дозировке до 30% Объем производства достигает 1000 т в год. Ограничений IFRA нет

3.73. Терпинилпропионат

1-п-Ментен-8-илпропионат, Terpinyl propionate (Arc. 2891, RIFM, GIV) $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

C. A. 80-27-3

Содержится в кайепутовом ЭМ.

Запах — травянисто-фруктовый, иоты сосны, лаванды. Жидкость, т. кип. 240°C/ 1013 гПа. Содержит примеси изомерных пропионатов.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт, по данным GIV (1961), содержит не менее 95% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 0,944–0,949; n_D^{20} 1,462–1,466; т. всп. >100°C.

Может быть получен ацилированием терпинеола пропионовым ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.74. Терпинилизобутират

1-п-Ментен-8-илизобутират, Terpinyl isobutyrate (Arc. 2887, RIFM), Neolavandate (Quest). $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34

C. A. 7774-65-4

Запах — фруктово-травянистый с нотой бергамота. Жидкость, т. кип. 242°C/1013 гПа; 125–126°C/14 гПа. Содержит примеси изомерных соединений.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}>5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Quest (1989) имеет d_{20}^{20} 0,934–942; n_D^{20} 1,460–1,463; т. всп. 87°C.

Может быть получен ацилированием терпинеола ангидридом изомасляной кислоты или осторожной (во избежание дегидратации терпинеола) этерификацией изомасляной кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%, а также в некоторых пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

3.75. Дигидротерпинилацетат

п-Ментан-8-илацетат, Dihydro terpinylacetate (Arc. 971, RIFM, IFF), Menthanyl acetate (GIV). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

С. А. 80-25-1;
26252-11-9;
58985-18-5

Запах — свежий, сосновый, ноты бергамота, лаванды. Жидкость, т. кип. 67–70°С/2 гПа. Смесь п-ментан-8-илацетата (α) и п-ментан-1-илацетата (β) и их *цис-транс*-изомеров.

Острая токсичиость по RIFM (1974) — derm. LD_{50}>5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание суммы изомеров (ГЖХ), %	Состав %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	97	Четыре изомера	0,933–0,939	1,448–1,453	94
IFF, 1992	95	α-транс 20–35			
		α-цис 25–40	0,931–0,939	1,447–1,451	>100
		β-транс 15–30			
		β-цис 10–20			

Может быть получен каталитическим гидрированием терпинилацетата или ацетилированием дигидротерпинеола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и в отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.76. Бергамилат

10-Ацетоксиметил-1,8-п-ментадиен, Agrumylacetat (Miltitz), Citryl acetate (Dragoco), Bergamylat (РФ). $C_{13}H_{20}O_{20}$; 208,30

С. А. 6819-19-8

Запах — цветочно-фруктовый с нотами бергамота, розы. Жидкость, т. кип. 255°С/1013 гПа; 105–107°С/6,7 гПа. Смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Miltitz, 1991	95 (омыл.)	0,975–0,995	20/20	1,480–1,485	>100
Dragoco	–	0,971–0,978	20/4	1,479–1,485	>110
РФ, 1990	85 (омыл.)	0,965–0,978	20/4	1,481–1,482	116

Получают нагреванием смеси дипентена или лимонена с параформом в избытке уксусной кислоты.

Используют главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

3.77. Цитробергамат

1-(4-Изопропилциклогексадиенил)-этилформиат, Citrobergamate (Dragoco). $C_{12}H_{18}O_2$; 194,27

Запах — цитрусово-цветочный с древесно-травянистой нотой. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт Dragoco (1990) имеет d_4^{20} 0,981–0,992; n_D^{20} 1,482–1,492; т. всп. >110°C.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.78. Изобергамат

2-(4-Изопропилциклогексадиенил)-этилформиат, п-ментадиен-7-илметилформиат, Isobergamate (Dragoco).	$C_{12}H_{18}O_2$; 194, 27

Запах — мягкий, цветочно-фруктовый с цитрусовой и древесной нотами. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Dragoco содержит формиатов не менее 98% (омыл.) и имеет d_4^{20} 0,990–0,997; n_D^{20} 1,486–1,491; т. всп. > 110°C. Его получают, по всей вероятности, при обработке нопола муравьиной кислотой.

Если нопол изомеризовать в соответствующий моноциклический спирт и получить его формиат, то запах и показатели образовавшегося вещества (d_4^{20} 0,9663; n_D^{20} 1,4832) несколько отличаются от данных продукта Dragoco (Lucius G., Alder E., пат. ГДР 78237, 31.12.68–12.12.70, РЖХ, 1972, 5Р530П).

Изобергамат рекомендуется использовать в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

3.79. Циклопентенилпропионат

2,2-Диметил-3-(2-метил-5-изопропенил-1-циклопентен-1-ил)-пропилпропионат, Cyclopentenyl propionate musk (RIFM), Cyclopentenylpropionat (BASF).	$C_{17}H_{28}O_2$; 264, 41
С. А. 84012-64-6	

Запах — древесно-мускусный с нотой санталового масла.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

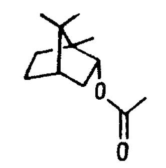
В соответствии с патентом BASF (Hoffmann W., Frauenberg K., заявка ФРГ 2513996, 29.03.75–30.09.76, РЖХ, 1977, 17Н102П) может быть получен многостадийным синтезом с последовательными превращениями:

Такая многостадийность, по всей вероятности, и является препятствием для организации крупного промышленного производства.

Может быть использован в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.80. Борнилацетат

Эндо-2-ацетоксиборнан, laevo-Bornyl acetate (Arc. 353, RIFM), Bornyl acetate pure laevo (GIV).	$C_{12}H_{20}O_{20}$; 196, 29
С.А. 76-49-3; 5655-61-8	



Содержится в пихтовом ЭМ, а также во многих ЭМ *Pinaceae*, как правило, в (–)-форме.

Запах — сосново-камфарный, бальзамический. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. пл. 29°C; т. кип. 107°C/20 гПа; 98°C/13,3 гПа; $[\alpha]_D^{20}$ — 44°.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 10 мл/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продукт должен содержать не менее 99% (омыл.) сложного эфира и иметь т. заст. ≥ 25°C; d_{25}^{25} 0,981–0,984; n_D^{20} 1,462–1,465; т. всп. 83°C; $[\alpha]_D^{20}$ от −40° до −44°.

Традиционные методы получения состоят в выделении из ЭМ или в ацетилировании (-)-борнеола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях или отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.81. Изоборнилацетат

Экзо-2-ацетоксиборнан, Isobornyl acetate (Arc. 354, RIFM, GIV, BBA, H.+R.). $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 125-12-2

Запах — сосново-камфарный. Камфарная нота сильнее, чем у борнилацетата. Жидкость, т. кип. 220–224°С/1013 гПа; 102–103°С/20 гПа; 70–71°С/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50}> 10 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 20 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	97 (омыл.)	0,980–0,984	25/25	1,461–1,464	91
H.+R., 1988	95 (омыл.)	0,980–0,983	25/25	1,462–1,465	71
BBA, 1990	90 (ГЖХ)	0,982–0,984	20/20	1,463–1,465	94
РФ, 1990	99 (омыл.)	0,977–0,984	20/4	1,463–1,464	91
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,980–0,986	25/25	1,461–1,465	88

Производится сотнями тонн. Традиционный метод получения состоит во взаимодействии камфена с уксусной кислотой в присутствии серной кислоты. Возможно также получение при катализе ионообменными смолами или активированной глиной (Молдованская Г. И. и др., Масло-жировая пром-сть, 1976, № 1, с. 29).

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

3.82. Изоборнилпропионат

Экзо-2-борнилпропионат, Isobornyl propionate (Arc. 363, RIFM, IFF). $C_{13}H_{22}O_2$; 210, 32

С. А. 2756-56-1

Запах — свежий, древесный с травянистой нотой. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомерных пропионатов, в том числе минимум 88% (ГЖХ) изоборнилпропионата и до 10% (ГЖХ) борнилпропионата, и имеет d_4^{20} 0,968–0,976; n_D^{20} 1,460–1,464; т. всп. > 100°С. Получают взаимодействием камфена с пропионовой кислотой в присутствии кислотного катализатора.

Используют в парфюмерных композициях и главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

3.83. Миртенилацетат

10-Ацетокси-2-пинен, Myrtenyl acetate (Arc. 2295, RIFM, BBA). $C_{12}H_{18}O_2$; 194,27

С. А. 1079-01-2

Содержится в некоторых ЭМ.

Запах — фруктово-травянистый с цитрусовой нотой. Жидкость, т. кип. 135°С/50 гПа; 105–107°С/12 гПа.

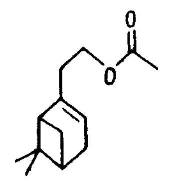
Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} 2,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт BBA (1990) содержит не менее 95% (ГЖХ) миртенилацетата и имеет d_{20}^{20}0,985–0,991; n_D^{20} 1,472–1,473; т всп. 94°С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.84. Нопилацетат

10-Ацетоксиметил-2-пинен, 2-(6,6-диметилбицикло[3,1,1]-2-гептен-2-ил)-этилацетат, Nopyl acetate (Arc. 2384, RIFM, BBA).	$C_{13}H_{20}O_2$; 208,30



С. А. 128-51-8

Запах — древесный с цитрусовой нотой. Жидкость, т. кип. 122°С/15 гПа; 118°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
BBA, 1990	97 (ГЖХ)	~0,979	20/20	~1,473	>110
РФ, 1990	96 (омыл.)	~0,980	20/4	1,471-1,473	—
IFF, 1992	—	0,976-0,984	25/25	1,470-1,476	>100

Может быть получен ацетилированием нопола (Л. С. Авакова и др., Труды ВНИИСНДВ, IX, 1971, с. 111) или взаимодействием *бета*-пинена с формальдегидом и уксусной кислотой в присутствии серной кислоты.

Используют в значительных количествах для производства парфюмерных композиций и главным образом отдушек для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

3.85. Вальтерилацетат

4-Ацетоксиметил-2-карен, Turylacetat-*gamma* (Dragoco), Valteryl acetate (РФ).	$C_{13}H_{20}O_2$; 208,30

Запах — травянисто-древесный. Жидкость, т. кип. 110°С/6,7 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Dragoco, 1989	—	0,975-0,981	1,473-1,477	116
РФ, 1990	88 (омыл.)	~0,980	1,476-1,480	105

Получают взаимодействием 3-карена с уксусной кислотой и параформом при кипячении реакционной массы (Л. С. Авакова, С. Д. Кустова, Труды ВНИИСНДВ, вып. VII, 1965, с. 29).

Используют в сравнительно ограниченном числе парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

3.86. Метиловый эфир изокамфановой кислоты

Метил-2,2-диметилнорборнил-3-карбоксилат, метил-(2,2-диметилбицикло[2,2,1]-гепт-3-ил)-карбоксилат, Cistulate (Quest, Naarden).	$C_{11}H_{18}O_2$; 180,25

С. А. 52557-97-8

Запах — сосновый с нотами розмарина, мускатного шалфея. Жидкость, т. кип. 80°С/4 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 11,7 мл/кг (крысы).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 92% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет $d_{20}^{20} 1,008-1,011$; n_D^{20} 1,467-1,470; т. всп. 94°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5% Ограничений IFRA нет.

3.87. Цедрилформиат

2,2,6,10-Тетраметил-10-формокситрицикло[5,3,1,$0^{3,7}$]ундекан, Cedryl formate (Arc. 602, RIFM), Cedrenyl formate (IFF).

$C_{16}H_{26}O_2$; 250,39

C. A. 39900-38-4

Запах — сильный, древесно-пудровый с амбровой нотой. Жидкость. Смесь изомеров цедрилформиата и цедрена.

Острая токсичность по RIFM (1992): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF в соответствии со спецификацией 1979 г. должен содержать сложных эфиров в расчете на цедрилформиат не менее 65% (омыл.) и иметь $d_{25}^{25}1,005-1,022; n_D^{20}$ 1,498-1,503. Спецификация IFF (1992) регламентирует содержание цедрилформиата 50-60% (ГЖХ), $d_4^{20}1,011-1,026; n_D^{20}$ 1,498-1,504; т. всп. >101°C.

Продукт такого качества может быть получен взаимодействием муравьиной кислоты с жидкой фракцией кедрового масла, полученной после отделения кристаллического цедрола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

3.88. Цедрилацетат

10-Ацетокси-2,2,6,10-тетраметилтрицикло[5,3,1,$0^{3,7}$]ундекан, Cedryl acetate (Arc. 600, RIFM, GIV, IFF, H. + R.), Cedrenyl acetate (IFF).

$C_{17}H_{28}O_2$; 264,41

C. A. 77-54-3; 61789-42-2

Запах — кедрово-ветиверовый. Кристаллическое вещество, т. пл. ~80°C.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 44,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Существуют две модификации коммерческих продуктов:

А. Кристаллический цедрилацетат

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
GIV, 1984	97 (омыл.)	43	>100
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	45	>100

Б. Жидкий цедр(ен)илацетат

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	50 (омыл.)	0,978–0,998	20/4	1,497–1,502	119
IFF, 1992	50 (ГЖХ)	0,986–1,016	20/4	1,493–1,502	>101
IFF, 1992	профиль ГЖХ, 30–45	0,977–0,987	20/4	1,497–1,503	>100
H. + R., 1988	80 (омыл.)	0,992–1,017	25/25	1,495–1,503	126

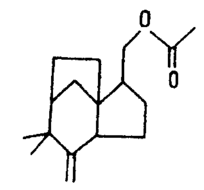
Получают ацетилированием цедрола или фракций кедрового масла.

Используют во многих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет. Объем производства достигает сотни тонн в год.

3.89. Ветиверилацетат

Смесь ацетатов бициклических и трициклических спиртов ветиверового масла, в том числе ацетат трицикловетивенола (хусимола), Vetiveryl acetate (Arc. 3082), Vetiver acetate (RIFM, GIV), Vetivert acetate (IFF), Acetivenol (Roure).

$C_{17}H_{26}O_2$; 262,,40



C. A. 117-98-6; 68917-34-0

Запах — приятный, ветиверовый с древесной нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 150–160°C/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание сложных эфиров, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	extra, Haiti	61 (ГЖХ)	0,992–1,000	25/25	1,509–1,515	>100
GIV, 1961	extra	60 (омыл.)	0,980–1,010	25/25	1,511–1,519	99
Roure, 1982	—	96 (омыл.)	1,005–1,025	20/20	1,503–1,506	159
РФ, 1990	В. сорт.	55 (омыл.)	—	—	1,510–1,517	122

В РФ получают кипячением смеси ветиверового масла, толуола и уксусного ангидрида (при азеотропной отгонке образующейся уксусной кислоты) и последующей фракционированной дистилляцией полученной смеси (Богачева К. И. и др., Масло-жировая пром-сть, 1968, № 3 с. 30, РЖХ, 1968, 16Р481).

Известен способ увеличения содержания хусимола в ветиверовом масле путем изомеризации изоваленсеиола (Fujikura Y. и др., пат. США 4937073, 27.01.89–26.06.90, РЖХ, 1991, 23Р2043П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках широкого ассортимента. Ограничений IFRA нет. Объем производства исчисляется десятками тонн.

3.90. Санталилацетат

5-(2,3-Диметилтрицикло-[2,2,1,$0^{2,6}$]-гепт-3-ил)-2-метил-2-пентенилацетат, Santalyl acetate (Arc. 2821, RIFM, GIV, IFF).

$C_{17}H_{26}O_2$; 262,40

альфа-санталилацетат

С. А. 1323-00-8

Запах — санталовый, стойкий с мускусным оттенком. Жидкость

Смесь *альфа*- и *бета*-изомеров. Продажные сорта обычно содержат 50–70% *альфа*-санталилацетата и 20–40% *бета*-санталилацетата.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	95 (омыл.)	0,981–0,985	1,488–1,491	>100
IFF, 1992	85 (ГЖХ, сумма изомеров)	0,980–0,988	1,486–1,492	>100

Получают ацетилированием сантaлола. Используют в дорогих парфюмерных композициях при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.91. Кариофилленацетат

Смесь ацетатов кариоланола (I) и клован-2-ола (II), Caryophyllene acetate (Arc. 585, RIFM), Caryolan (Firm.).

$C_{17}H_{28}O_2$ 264,41

I II

С. А. 32214-91-8

Запах — мягкий древесно-фруктовый, свежий, стойкий. Жидкость. Смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Может быть получен присоединением уксусной кислоты к кариофиллену (обычно это — фракция гвоздичного масла) в присутствии кислотного катализатора (см. например, Ansari H. R. и др., англ. пат. 1580184, 4.03.76–26.11.80, РЖХ, 1981, 15Р356П). Такое присоединение сопровождается изомеризацией бициклической системы молекулы в трициклическую (I и II):

CH_3COOH → I + II

При проведении реакции при 20°С соотношение I:II≈4:6.

Кариофилленацетат используют в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов. Ограничений IFRA нет.

3.92. Гвайилацетат

Смесь ацетатов гвайола и бульнесола, Guaiyl acetate (Arc. 1480, IFF), Guaiacwood acetate (RIFM, GIV, H. + R.). $C_{17}H_{28}O_2$; 264,41

C. A. 134-28-1; 61789-17-1

Запах — древесный, стойкий с цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 118–123°С/3 гПа. Смесь изомерных ацетатов и сесквитерпеновых углеводородов.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

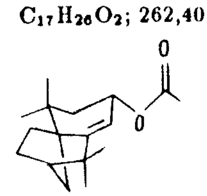
Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	экстра	83 (омыл.)	0,975–0,985	1,487–1,495	>100
GIV, 1961	прима	70 (омыл.)	0,975–0,990	1,488–1,498	>100
H.+R., 1988	—	70 (омыл.)	0,960–0,980	1,491–1,498	>100
IFF, 1992	—	70 (ГЖХ)	0,969–0,984	1,485–1,495	>100

Получают ацетилированием фракции ЭМ гваякового дерева действием уксусного ангидрида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.93. Изолонгифоленилацетат

5-Ацетокси-2,2,7,7-тетраметилтрицикло-[6,2,1,0^3,8]-3-ундецен, Isolongifolenyl acetate, Isolongifolylacetat (Höchst). $C_{17}H_{26}O_2$; 262,40



Запах — древесный, ветиверового масла. Жидкость, т. кип. 131°С/2,7 гПа. Смесь изомеров.

В соответствии с патентом BBA (Curtis A. J. и др., англ. пат. 1256535, 29.09.69–8.12.71, РЖХ, 1972, 10Р393П) изолонгифоленилацетат получают взаимодействием изолонгифолена с уксусной кислотой и бензоилтретбутилпероксидом в присутствии солей меди. Полученный продукт имеет d_{25}^{25} ~1,011 и n_D^{20} ~1,500.

В КНР вырабатывается 70%-ный изолонгифоленилацетат с т. всп. 108°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.94. Формилоксиметилизолонгифолен

4-Формоксиметил-2,2,7,7-тетраметилтрицикло-[6,2,1,0^3,8]-3-ундецен и тетрациклический изомер, Amborate (BBA). $C_{17}H_{26}O_2$; 262,40

Запах — древесный с нотами амбры, шалфея, ириса. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт BBA (1990) имеет ЭЧ 182; d_{20}^{20} ~ 1,025; n_D^{20} ~1,499; т. всп. >100°С.

Может быть получен взаимодействием изолонгифолена с параформом и муравьиной кислотой (Ansari H. R. и др., пат. США 4100110, 11.07.78).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.95. Ацетоксиметилизолонгифолен

4-Ацетоксиметил-2,2,7,7-тетраметилтрицикло-[6,2,1,$0^{3,8}$]-3-ундецен и тетрациклический изомер, Amboryl acetate (BBA)	$C_{18}H_{28}O_2$; 276,42

Запах — стойкий древесный с нотами амбры, ветиверилацетата. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт BBA (1990) имеет ЭЧ 176; d_{20}^{20} ~ 1,018; n_D^{20} ~1,500; т. всп. >100°C.

Может быть получен по реакции Принса взаимодействием изолонгифолена и параформа в уксусной кислоте в присутствии небольших количеств серной кислоты (Ansari H. R. и др., пат. США 4100110, 11.07.78).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

3.96. Метилабиетат

Метиловый эфир абиетиновой кислоты, Methyl abietate (Arc. 1892, RIFM), Abalyn (H. + R.).	$C_{21}H_{32}O_2$; 316,49

C. A. 68186-14-1

Запах — очень слабый, древесно-ароматический. Вязкая жидкость, т. кип. 220-225°C/13 гПа. Смесь метиловых эфиров смоляных кислот. Обладает фиксирующими свойствами.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В РФ вырабатывается метилабиетат с d_4^{20} 1,033 – 1,042; n_D^{20} 1,525 1,535; т. всп. 178°C.

В соответствии со спецификацией H. + R. (1988) Abalyn supra должен иметь d_{25}^{25} 1,027 – 1,045; n_D^{20} 1,527–1,532; т. всп. >100°C.

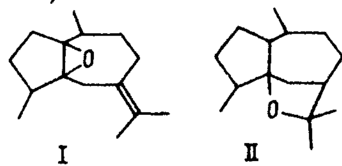
Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

Каталитическое гидрирование метилабиетата на скелетном никелевом катализаторе (240–260 кгс/см²; 210–220°C) позволяет получить метиловый эфир тетрагидроабиетиновой кислоты (т. кип. 183–187°C/5,3 гПа; d_4^{20} ~ 1,024; n_D^{20} ~1,529) — более стабильный и светлый продукт по сравнению с метилабиетатом. (С. Д. Кустова, В. Н. Белов, Труды ВНИИСНДВ, вып. II, 1954, с. 58).

3.97–3.106. ОКСИДЫ, БИЦИКЛИЧЕСКИЕ И ТРИЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ

3.97. Гвайоксид

Смесь эпокси-1,4-диметил-7-изопропилиденоктагидроазулена (I) и 2,6,10,10-тетраметил-11-оксатрицикло-[7,2,1,$0^{1,5}$]-додекана (II), Epoxyguaiene (RIFM), Ebenolane (Roure).	I. $C_{15}H_{24}O$; 220,36 II. $C_{15}H_{26}O$; 222,38



C. A. 68071-23-8

Содержится в ЭМ гваякового дерева.

Запах — сильный древесный с нотой пачули. Жидкость. Смесь оксидов с сесквитерпеновыми спиртами и углеводородами.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} ~ 1,010; n_D^{20} ~1,496, т. всп. 125°C.

Используют в парфюмерных композициих и отдушках. Ограиничений IFRA нет.

3.98. Кариофилленоксид

4,5-Эпоксидигидрокариофиллен, Caryophyllenoxide.	$C_{15}H_{24}O$; 220,36

C. A 1139-30-6

Содержится в гвоздичном, лавандовом и других ЭМ.

Запах — древесный с амбровой нотой. Кристаллы, т. пл. 64°C; т. кип. 114-117°C/2,4 гПа; 79-81°C/0,13 гПа. Данные рентгеноструктурного анализа: Гатилов Ю. В. и др., Химия природных соединений, 1982, № 6, 715, РЖХ, 1984, 5Б2139.

Может быть получен окислением кариофиллена надкислотами при температуре, близкой к комнатной.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках.

3.99. Цедренэпоксид

8,9-Эпоксицедран, *alpha*-Cedrene epoxide (Arc 594), Cedr-8-ene epoxide (RIFM), Cedrenepoxid (Dragoco), Andrane (IFF). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

C.A. 13567-39-0

Запах — приятный древесный, ноты кедра, пачули. Жидкость. Смесь изомеров. Содержание *альфа*–цедренэпоксида ~85%.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	90 (два изомера	0,996–1,004	1,493–1,500	>100
Dragoco	70 (альфа-изомер)	0,995–1,005	1,495–1,500	>110

Получают эпоксидированием цедреновой фракции, выделяемой из кедрового ЭМ.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.100. Изолонгифоленоксид

Эпоксидигидроизолонгифолен, Isolongifolene epoxide, Folenox (GIV), Oxysesquine (PFW). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

C.A. 26619-69-2

Запах — древесный, пряный. Жидкость. Смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	70	0,994–0,998	25/25	1,492–1,495	> 100
PFW, 1983	—	0,994–0,999	20/20	1,494–1,497	>100

Может быть получен эпоксидированием изолонгифолена в мягких условиях.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках для мыла, синтетических моющих средств и косметических изделий при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

3.101. Калареноксид

Эпоксидигидрокаларен, 1,3,3,11-тетраметил-7,8-эпокситрицикло[5,4,0,$0^{2,4}$]ундекан, Ambracene, Romanal (Dragoco). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

C.A. 68926-75-0

Запах — приятный древесный, ноты амбры, ветиверии, пачули. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажные продукты Dragoco (1989) содержат не менее 75% (ГЖХ) названного эпоксида и имеют d_4^{20} 0,988–0,999; n_D^{20} 1,492–1,502; т. всп. >100°C.

Может быть получен эпоксидированием каларена, выделяемого из аирного ЭМ.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов. Ограничений IFRA нет.

3.102. Амброксид

2,6,6,10-Тетраметил-11-оксатрицикло $[8,3,0,0^{2,7}]$тридекан, 8,12-эпокси-13,14,15,16-тетранорлабдан, Ambrox, Ambrox DL (Firm), Ambroxan (Henkel), Synambran (Wacker).

$C_{16}H_{28}O$; 236,40

C.A. 6790-58-5; 65588-69-4

Является одним из важнейших компонентов натуральной серой амбры.

Запах — очень сильный, богатый амбровый запах с мягким древесным нюансом. Кристаллическая масса, т. пл. 75-76°C, т. кип. 102-106°C/0,1 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel, — oral LD_{50} > 3,1 г/кг (мыши).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
Firm., 1983	Ambrox	60 (осн. изомер)	50	—
Firm., 1992	Ambrox DL coeur	—	55	>100
Henkel	Ambroxan	90 (сумма изомеров)	—	161
Wacker, 1987	Synambran	90 (сумма изомеров)	—	65
РФ, 1990	Амброксид	—	20	—

Традиционный способ промышленного получения состоит в окислении склареола до лактона-склареолида, дальнейшем восстановлении до диола и в дегидратации последнего:

(Stoll M., Hinder M., Helv. Chim. Acta 1950, **33**, 1308; Сибирцева В. Е и др., Труды ВНИИСНДВ, вып. V, 1961, с. 9; G. Ohloff, Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verl., 1990, 212).

Объем выработки склареола, который выделяется из растительных отходов мускатного шалфея (Гусева К. А., Масло-жировая пром-сть, 1959, № 3, 29), в первые годы удовлетворял потребности производства амброксида для парфюмерии. Однако ограниченность ресурсов склареола и его высокая цена привели к необходимости разработки новых промышленных методов. Один из таких способов состоит в циклизации фарнезилкарбоновой кислоты до склареолида (Steiger G., Macri A., заявка ФРГ 3240054, 28.10.82-3.05.84, РЖХ, 1985, 8Р523П).

Далее, по всей вероятности, используются традиционные методы. Появление на рынке (±)-амброксида (Ambrox DL) показывает, что основоположник его промышленного производства Firm. (Швейцария) также перешел на новую схему производства.

Амброксид используется в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов. Эффективен при применении в очень малых концентрациях. Ограничений IFRA нет.

3.103. *гомо*—Амброксид

2,6,6-Триметил-10-этил-11-оксатрицикло-$[8,3,0,0^{2,7}]$-тридекан и изомеры. Grisalva (Arc. 1213, RIFM, IFF).

$C_{17}H_{30}O$; 250,43

C.A. 68611-23-4

Запах — древесный, амбровый, сильный. Жидкость. Многокомпонентная смесь.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) смеси изомеров названного соединения и имеет d_4^{20} 0,962-0,970; n_D^{20} 1,493-1,500; т. всп. >100°C.

По данным RIFM (Food Cosm. Toxicologie 1982, **20**, 695), получают кислотно-термической перегруппировкой склареола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 0,5%. Ограничений IFRA нет.

3.104. Цедрилметиловый эфир

8-Метоксицедран, Cedrol methylether (Arc. 599, RIFM), Cedramber (IFF). $C_{16}H_{28}O$; 236,40

С.А. 19870-74-7

Запах — древесно-кедровый с амбровой нотой. Жидкость, т кип. 96°С/1,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажные продукты IFF (1992) имеют следующие характеристики:

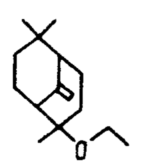
Cedramber — чистота 92% (ГЖХ); d_4^{20} 0,972–0,980; n_D^{20} 1,494–1,498; т. всп. >100°С, Cedramber regular — чистота 47–57% (ГЖХ); d_4^{20} 0,977–0,987; n_D^{20} 1,498–1,506; т. всп. >100°С.

Может быть получен метилированием цедрола диметилсульфатом (Blumenthal J. H., пат. США 3373208, 20.05.66–12.03.68, франц. пат. 1527264, 19.05.67–31.05.68).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

3.105. Физеол

2,6,6-Триметил-9-метилен-2-этокси-бицикло-[3,3,1]-нонан, Physeol (Firm.), Boisiris (GIV). $C_{15}H_{26}O$; 222,38



С.А. 68845-00-1

Запах — ириса с древесной и амбровой нотами, стойкий. Жидкость. Смесь *эндо* — *экзо*—изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Firm, 1985–1992	80	0,928–0,936	20/20	1,481–1,485	89
GIV, 1991	96 (сумма изомеров) *экзо* – 61, *эндо* – 35	~0,929	20/4	~1,483	100

Может быть получен циклизацией дигидро-*альфа*—ионона действием хлористого водорода в этиловом спирте (Stoll M., Helv. Chim. Acta 1955, **38**, с. 1573, 1593).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

3.106. Лоранол

Смесь *экзо*—2-(2-гидроксипропилокси)-борнана и *экзо*—2-(1-гидрокси-2-пропилокси)-борнана, смесь 1-изоборнилоксипропан-2-ола (I) и 2-изоборнилоксипропанола (II), Loranol (РФ). $C_{13}H_{24}O_2$, 212,33

Запах — древесно-камфарный с мускусным оттенком. Жидкость, т. кип. 104–106°С/4 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral LD_{50} 4,8 г/кг.

Продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 94% (ГЖХ) смеси названных гидроксиэфиров, имеет n_D^{20} 1,470–1,472.

Получают взаимодействием камфена с 1,2-пропандиолом (Podlejski J. и др., пат. ПНР 136072, 1.08.84–31.12.86, РЖХ 1987, 20Р556П; Платова А. И. и др., Пищевая пром-сть, 1992, № 6, с. 23). Соотношение изомеров I:II=(3-5):1.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

4. ЦИКЛОАЛИФАТИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ

4.1–4.22. Спирты
4.23–4.40. Альдегиды и ацетали
4.41–4.87. Кетоны и кетали
4.88–4.124. Сложные эфиры
4.125–4.13:. N-содержащие соединения, полициклические простые эфиры

4.1–4.22. СПИРТЫ

4.1. 4-Изопропилциклогексанол

4-Iso-Propyl cyclohexanol (Arc. 2692), p-Isopropylcyclohexanol (RIFM), Folrosia (GIV), Apopatchone (IFF).

$C_9H_{18}O$; 142,24

OH

C.A. 4621-04-9

Запах — цветочный, ноты розы, сирени, оттенки зелени, мяты. Жидкость, т. кип. ~210°C/1013 гПа, смесь *цис*- и *транс*-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 2,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Состав (ГЖХ),%
GIV, 1986	98	0,914–0,919	20/4	1,465–1,469	95	*цис*- 20–35 *транс*- 65–80
IFF, 1992	97	0,913–0,921	20/4	1,463–1,469	91	*цис*- 30–35 *транс*- 65–70

Простейший способ получения — каталитическое гидрирование 4-изопропилфенола.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в количествах до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.2. Циклогексилэтиловый спирт

2-Циклогексилэтанол, Cyclohexyl ethyl alcohol (Arc. 791, RIFM, IFF), Cyclohexyl ethanol (BASF).

$C_8H_{16}O$, 128,22

OH

C.A. 4442-79-9

Запах — цветочно-травянистый, оттенки запаха розы, сирени, зелени. Жидкость, т. кип. 204-206°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 0,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 1,2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
BASF, 1987	98	0,918–0,922	25/25	1,463–1,467	93,5
IFF, 1992	97	0,918–0,926	25/4	1,463–1,469	86

Обычно получают каталитическим гидрированием фенилэтилового спирта. Возможно получить каталитическим гидрированием оксида стирола при 140°C и 300 кгс/см² (КТ—никель на окиси хрома. Баринов Н. С. и др., авт. свид. СССР № 578295, 7.03.75-4.01.78, РЖХ, 1978, 15Н107П). Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ввод – до 50%. Ограничений IFRA нет.

4.3. Триметилциклогексанол

3,3,5-Триметилциклогексанол, циклонол, Trimethyl cyclohexanol (Arc. 2998), 3,3,5-Trimethylcyclohexanol (RIFM, Hüls), Cyclonol

$C_9H_{18}O$; 142,24

OH

C.A. 116-02-9;
933-48-2 (*цис*-изомер)

Запах — мятно-камфарный. Кристаллы или кристаллическая масса, т. пл. 37-57°C (в зависимости от соотношения *цис-транс*-изомеров), т. кип. ~198°C; n_D^{60} 1,439. Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Hüls производит два сорта продукта:

цис-изомер — чистота > 98% (ГЖХ); т. заст. 37°C; d_4^{60} 0,860; т. всп. 88°C;

смесь изомеров — чистота > 98% (ГЖХ, сумма изомеров); т. заст. 37-57°C; d_4^{60} 0,860; т. всп. 76°C.

Промышленный синтез осуществляют каталитическим гидрированием изофорона. Ограничений IFRA для ввода в парфюмерные композиции и отдушки нет. Ввод в композиции обычно не более 2%.

4.4. Триметилциклогексилэтиловый эфир

3,3,5-Триметилциклогексилэтиловый эфир, этиловый эфир циклонола, Herbavert (Henkel). $C_{11}H_{22}O$; 170,30

C.A. 24691-17-6

Запах — фруктово-травянистый. Жидкость, т. кип. 108°C/56 гПа. Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% названного эфира и имеет $d_4^{20} \sim 0,848$; n_D^{20} 1,432-1,436; т. всп. 51°C. Может быть получено из соответствующего триметилциклогексанола при взаимодействии с этиловым спиртом и серной кислотой.

Рекомендуется для парфюмерных композиций, используемых при производстве шампуней и препаратов для ванны. Ограничений IFRA нет.

4.5. Диметилтетрагидробензиловый спирт

Диметилциклогексенилметанол, 2,4-диметилтетрагидробензиловый спирт, Floralol (IFF). $C_9H_{16}O$; 140,23

C.A. 67634-16-6

Запах — цветочный, свежей зелени, ноты гиацинта, ландыша. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) суммы изомеров названного спирта (I — 20-50%, II — 48-78%) и имеет d_4^{20} 0,939-0,947; n_D^{20} 1,482-1,487; т. всп. > 100°C.

Получают селективным каталитическим гидрированием соответствующего альдегида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.6. Диметилгексагидробензиловый спирт

2,4-Диметилциклогексилметанол, 2,4-Dimethyl cyclohexane methanol, Dihydro floralol (IFF). $C_9H_{18}O$, 142,24

C.A. 68480-15-9

Запах — цветочный, с мятным оттенком. Жидкость, смесь изомеров.

IFF (1992) производит продукт, содержащий не менее 97% (ГЖХ) суммы трех изомерных циклогексановых спиртов, со следующими характеристиками: $d_4^{20} 0,907 - 0,915$; n_D^{20} 1,461-1,467; т. всп. 91°C. Получают исчерпывающим каталитическим гидрированием продуктов диенового синтеза акролеина с 2-метил-1,3-пентадиеном или кротонового альдегида с изопреном. Ограничений IFRA нет. Ввод в парфюмерные композиции и отдушки до 20%.

4.7. Изоциклогераниол

2,4,6-Триметил-3-циклогексен-1-илметанол, Isocyclogeraniol (IFF). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 68527-77-5

Запах — пряный, цветочный, с травянистым оттенком. Жидкость, смесь изомеров.

IFF (1992) вырабатывает продукт, содержащий не менее 98% (ГЖХ, сумма двух изомеров) спиртов и имеющий $d_4^{20} 0,926 - 0,934$; n_D^{20} 1,479-1,484; т. всп. >100°C.

Получают восстановлением изоциклоцитраля. Ограничений IFRA нет. Изготовитель рекомендует вводить в композиции до 30% продукта.

4.8. 4-Третичнобутилциклогексанол

пара-Трет. бутилциклогексанол, *para*-tert. Butyl cyclohexanol (Arc. 433, KAO), 4-tert. Butylcyclohexanol (RIFM, Hüls), Patchone (IFF).

$C_{10}H_{20}O$; 156,27

С. А. 98-52-2

Запах — древесно-камфарный. Кристаллическая масса, т. пл. 55–70°C; т. кип. 110–115°C/20 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	Соотношение *цис-транс*	Т. пл., °C	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	*цис* >27% *транс* < 73%	>60	85
Hüls, 1990	98	*цис* 25–33%	60–69	101
KAO, 1985	98	—	55–69	88

Производство впервые освоено в СССР в 1950 г. путем каталитического гидрирования *пара*-трет.бутилфенола по методу В. М. Родионова, В. Н. Белова, Э. А. Симановской (Труды ВНИИСНДВ, вып. I, 1952, с. 38), которые синтезировали и его ацетат.

Применение в парфюмерии 4-трет.бутилциклогексанола и его ацетата было запатентовано (пат. США 2582743, заявл. 15.01.52) фирмой Байер.

Позже было установлено, что *цис*-изомеры 4-трет. бутилциклогексанола и его ацетата имеют лучшие парфюмерные свойства. IFF и Hüls запатентовали способы получения продуктов, обогащенных *цис*-изомерами. (Пат. США 2840599, заявл. 1.03.60; заявка ФРГ 3401343, 17.01.84–9.05.85, РЖХ, 1986, 1Н101П). Используется в парфюмерных композициях и отдушках (ввод до 10%) и главным образом для производства 4-трет.бутилциклогексилацетата. Ограничений IFRA нет. Имеется запрет IFRA на применение 4-трет.бутилфенола, который может присутствовать в виде примеси.

4.9. 2-Третичнобутилциклогексанол

орто-Трет. бутилциклогексанол, ortho-tert. Butyl cyclohexanol (Arc. 432), 2-tert. Butylcyclohexanol (Hüls), Verdol (IFF).

$C_{10}H_{20}O$, 156,27

С. А. 1728-46-7

Запах — сильный камфарно-древесный, мятный, нота эвкалипта. Кристаллический продукт, т. пл. 52–53°C. Смесь *цис*- и *транс*-изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	Содержание цис-изомера, %	d_4^{80}	Т. пл., °C	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	>80	—	>44	78
Hüls, 1990	98	>80	0,868	~47	82

Получают каталитическим гидрированием *орто*-трет.бутилфенола. (Г. И. Молдованская и др. Труды ВНИИСНДВ, вып. VI, 1963, с. 29).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках (ввод до 5%) и главным образом для получения ацетата. Ограничений IFRA нет.

4.10. 2-Камфоленилпропанол

2-Метил-4-(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)бутанол, Brahmanol (Dragoco), Brahmanol F (Dragoco).

$C_{13}H_{24}O$; 172,33

С. А. 72089-08-8

Запах — сантанолового дерева с мускусным оттенком. Жидкость, т. кип. 110–133°C/2,7 гПа.

Dragoco вырабатывает две модификации продукта. Brahmanol: чистота ≥90% (ГЖХ); d_{20}^{20} 0,900–0,910; n_D^{20} 1,468–1,478; т. всп. >110°C. Brahmanol F: чистота ≥65% (ГЖХ); d_{20}^{20} 0,916–0,926; n_D^{20} 1,473–1,483; т. всп. > 110°C.

Получают альдольной конденсацией камфоленового альдегида с пропионовым альдегидом и последующим каталитическим гидрированием (Klein E., Brunke E.-J., заявка ФРГ 2827957, 26.06.78–10.01.80, РЖХ, 1981, 2Р464П).

Ввод в парфюмерные композиции рекомендуется 0,5–10%. Ограничений IFRA нет.

4.11. 2-Камфоленилиденпропанол

2-Метил-4-(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)-2-бутенол, Sandalmysore core (KAO), Madrol (Dragoco). $C_{13}H_{22}O$, 170,32

OH

Запах — древесный, сильный, типа санталового масла.

Впервые синтезирован и оценен М. Мюльштедтом и др. (пат. ГДР 68936, 8.05.68 – 20.09.69).

Продажный продукт KAO (1990) имеет чистоту ≥85% (ГЖХ); d_{20}^{20} 0,919–0,929; n_D^{20} 1,483–1,493; т. всп. 126°C.

Получают альдольной конденсацией камфоленового альдегида с пропионовым альдегидом с последующим восстановлением (Х. Мияваки, японск. заявка 55-36423, 8.09.78–14.03.80, РЖХ, 1981, 6Р490П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.12. 2-Камфоленилиденбутанол

2-Этил-4(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)-2-бутенол, Bacdanol (IFF), Sandranol (Dragoco), Bangalol (Quest), Sandelene (H. + R.). $C_{14}H_{24}O$; 208,34

OH

C. A. 28219-61-6

Запах — сильный, санталовый, с цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 127–130°C/2,7 гПа; 80–81°C/0,13 гПа. Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} > 5 г/кг, derm. LD_{50} > 2 г/кг.

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	92 (2 изомера)	0,914–0,918	20/4	1,486–1,490	>100
Dragoco, 1990	95 (2 изомера)	0,914–0,924	20/20	1,483–1,493	>100
Quest, 1989	90 (2 изомера)	0,916–0,920	20/4	1,486–1,491	>100

Впервые получен М. Мюльштедтом и сотр. путем конденсации камфоленового альдегида с масляным альдегидом и последующего восстановления (Mühlstädt M. и др., пат. ГДР 68936, 8.05.68 — 20.09.69). Возможно также селективное каталитическое гидрирование продукта конденсации (Wigers W. J. и др., пат. США 4619781, РЖХ 1987, 19Р498П, пат. США 4666629, РЖХ 1988, 2Р492П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.13. 3-Камфоленилбутан-2-ол

3-Метил-5-(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)-пентан-2-ол, Sandalor (GIV). $C_{14}H_{26}O$; 210,36

OH

C. A. 65113-99-7

Запах — древесный, подобный запаху санталового дерева. Жидкость, т. кип. 103–106°C/1,3 гПа; смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1987) имеет d_4^{20} 0,896 – 0,904; n_D^{20} 1,470–1,475; т. всп. >100°C. Он содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного спирта.

Получают альдольной конденсацией камфоленового альдегида с метилэтилкетоном и последующим восстановлением или каталитическим гидрированием продукта конденсации (Naipawer R. E.,

Easter W. M., пат. США 4052341, 29.04.76 — 4.10.77, РЖХ 1978, 11Р596П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.14. Полисантол

3,3-Диметил-5-(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)-4-пентен-2-ол, Polysantol (Firm.).

$C_{15}H_{26}O$; 222,39

Запах — сильный, санталовый, стойкий. Жидкость.

Продукт запатентован в качестве компонента парфюмерных композиций и отдушек (Schulte-Elte K.-H. и др., европейск. пат. 0155591, 23.03.84 — 25.05.88).

Может быть получен конденсацией камфоленового альдегида с метилэтилкетоном и последующими введением метильной группы и восстановлением.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.15. Декалол

2-Декалол, бицикло[4,4,0]-декан-3-ол, декагидро-*бета*-нафтол, Decahydro-*beta*-Naphtol (Arc. 824, IFF).

$C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 825-51-4

Запах — сильный с древесными и цветочными нотами. Полукристаллическая масса, смесь пространственных изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) имеет массовую долю спиртов ≥97% (ГЖХ) при содержании основных изомеров 74–82% и 15–20%; n_D^{20} 1,498–1,504; т. всп. >100°С.

Вводится в парфюмерные композиции и отдушки в количестве до 5%. Ограничений IFRA нет.

По данным С. С. Поддубной и др. (Масло-жировая пром-сть, 1987, № 7, с. 9–11), в декалоле, полученном гидрированием 2-нафтола на никелевых катализаторах, преобладают пространственные изомеры с *цис*-сочленением циклов.

4.16. Метилдиметилнорборнилкарбинол

2,2-Диметил-3-(1-гидроксиэтил)-бицикло-[2,2,1]-гептан, Camekol DH (IFF).

$C_{11}H_{20}O$; 168,27

C. A. 66062-78-0

Запах — свежий древесно-земляной, напоминает запах пачули.

IFF (1992) производит продукт, содержащий сумму изомерных спиртов ≥95% (ГЖХ) и имеющий d_4^{20} 0,966 – 0,974; n_D^{20} 1,483–1,489; т. всп. 86°С.

Получение основано на диеновом синтезе циклопентадиена с мезитил-оксидом и на последующем гидрировании полученного ненасыщенного бициклического кетона.

В парфюмерные композиции и отдушки рекомендуется вводить до 5% продукта. Ограничений IFRA нет.

4.17. Диметилциклормол

1,4-Диметил-9-гидрокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3-децен, 4,7-метано-2,4-диметил-3а,4,5,6,7,7а-гексагидро-1Н-инден-5-ол, Dimethyl cyclormol (IFF).

$C_{12}H_{18}O$; 178,27

C. A. 79771-15-6

Запах — камфарный, с характерным землистым оттенком запаха пачули, кожи. Жидкость, смесь изомеров.

По данным IFF (1992): oral LD_{50} 2 г/кг, derm. $LD_{50} > 5$ г/кг.

IFF (1992) вырабатывает продукт, содержащий >95% (ГЖХ) суммы изомеров; d_4^{20} 1,036 – 1,044; n_D^{20} 1,516–1,524; т. всп. >100°С.

Получение возможно осуществить из димера метилциклопентадиена. Ограничений IFRA по использованию этого вещества в парфюмерных композициях и отдушках нет. В их состав рекомендуется вводить до 5% продукта.

4.18. Санталидол, сантал-А

транс-3-(*экзо*-5-Изокамфил)-циклогексанол—носитель запаха, Isocamphyl cyclohexanol (Arc. 566, RIFM), Santalidol, Santal-A (РФ), Sandela (GIV), Sandel H. + R. (H. + R.), Santalex T (TAK), Indisan (IFF), Sandiff (IFF), Isobornylcyclohexanol (R.-P).

$C_{16}H_{28}O$; 236,40

С. А. 6784-13-0; 66068-84-6; 70955-71-4

Запах — древесный, сантaлового дерева, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 165–175°С/7 гПа, смесь структурных и пространственных изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
РФ, 1990, санталидол	0,994–1,013	20/4	1,506–1,507	139	
РФ, 1990, сантал-А	—	—	1,504–1,509	152	
GIV, 1987, Sandela	0,966–0,977	25/25	1,489–1,499	>100	Смесь с изопропилмиристатом
GIV, 1987, Sandela NP	0,959–0,969	25/25	1,485–1,495	>100	Смесь с изопропилмиристатом
H. + R., 1988	1,016–1,024	25/25	1,502–1,511	147	

Продолжение табл.

Изготовитель, сорт	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
TAK, 1987	0,970–0,995	25/25	1,490–1,510	160	
R.-P., 1981	~0,996	20/4	1,505–1,512	155	
IFF, 1992, Indisan	1,005–1,015	20/4	1,502–1,508	>100	65%-ный раствор в ДЭФ
IFF, 1992, Sandiff	0,988–0,998	20/4	1,485–1,495	>100	50%-ный раствор в ДПГ

Все коммерческие продукты представляют собой смеси структурных и пространственных изомеров терпенилциклогексанола. Их применение в парфюмерных композициях началось еще до того, как было установлено химическое строение носителя запаха.

В первой публикации (Byers J. R., Amer. Perf. Ess. Oil Rev., 1947, 49, № 5, с. 483) сообщалось, что, по данным военной разведки США, в Германии создано новое душистое вещество с санталовым запахом — 4-камфилциклогексанол. Ввиду обстоятельств военных лет этот продукт был запатентован позже (Weissenborn A., пат. ГДР 8201, 6.11.54, РЖХ 1956, № 4, 11050П). К этому времени в СССР уже была отработана технология синтеза санталидола путем конденсации камфена с гваяколом и последующего каталитического гидрирования. В 1956 г. была выработана первая производственная партия, а с 1957 г. началось регулярное производство санталидола, объем которого к 1975 году достиг 30 т в год.

Подобный продукт Sandela (GIV) появился на рынке в начале 60-х годов. Он также вырабатывался из гваякола и камфена. Позже стали производиться аналоги этих продуктов на других зарубежных фирмах.

Установление строения носителя запаха санталидола и того факта, что при гидрировании терпенилгваякола метоксильная группа отщепляется (E. Demole, швейц. пат. 423058, 3.09.63 — 29.04.67, РЖХ, 1968, 19Р457П, Helv. chim. acta 1964, **47**, с. 319, 1766; Л. А. Хейфиц и др. Журн. орг. хим. 1966, **2**, № 11, с. 2059, Сборник: Журн. общ. хим. Биологически активные соединения 1968, с. 157 и 166, IV Межд. конгресс по эфирн. маслам, Тбилиси, 1968, с. 391) позволило в ряде случаев отказаться от использования гваякола.

На IFF был разработан синтез так называемого "сандиффа" исходя из пирокатехина (Hall J. B., Wigers W. J., пат. США 4014994, РЖХ, 1978, 1Р468П), а в СССР создан способ производства "сантала-

А" непосредственно из фенола (Т. П. Черкасова и др., Масло-жировая пром-сть, 1982, № 1, с. 27).

Санталидол и его аналоги широко применяются в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.19. Метилсандефлор

1-(3-Метил-2-норборнен-6-ил)--2-метил-1-пентен-3-ол, Methyl sandeflor (ТАК). $C_{14}H_{22}O$; 206,33

OH

C. A. 67739-11-1

Запах — подобный запаху санталового дерева. Вязкая жидкость, т. кип. 80–81°C/1,3 гПа.

ТАК (1987) вырабатывает продукт чистоты > 95% (ГЖХ), имеющий d_{20}^{20} 0,980–0,985; n_D^{20} 1,490–1,500; т. всп. 122°C. Получение основано на диеновой конденсации метилциклопентадиена с акролеином, последующей альдольной конденсации бициклического альдегида с диэтилкетоном и восстановлении ненасыщенного кетона до спирта (Кобаяси Т. и др., японск. заявка 58-21632, 14.11.77 — 8.02.83, РЖХ 1985, 17Р537П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках.

4.20. Кедрол

2-Метил-4-(изокамф-5-ил)-циклогексанол и 2-метил-4-(изоборн-2-ил)-циклогексанол, Kedrol (РФ). $C_{17}H_{30}O$; 250,43

OH

Запах — древесный, напоминает запах кедра, стойкий. Вязкая жидкость, т. кип. 132–135°C/2,7 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ, содержит спиртов не менее 80% (ацетил.) и имеет $d_4^{20} 0,990 - 1,000$; n_D^{20} 1,502–1,508, т. всп. 139°C.

Смесь изомеров с преобладанием 4-изокамфил- и 4-изоборнил-замещенных.

Получают алкилированием *орто*-крезола камфеном и последующим каталитическим гидрированием (Weissenborn A., пат. ГДР 5051, 18.09.54, РЖХ 1956, № 4, 11049П; Хейфиц Л. А. и др., Журн. общ. хим. 1962, 32, с. 2717, 1963, 33, с. 2051).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках, особенно для мыла и моющих средств.

4.21. Магнол

2(3)-Этил-5-(гидроксициклогексил)--норборнан, 2(3)-этил-5-(гидроксициклогексил)--бицикло[2,2,1]гептан, Magnol (КАО). $C_{15}H_{26}O$; 222,37

OH

Запах — мягкий цветочный, оттенки запаха магнолии, ландыша, стойкий. Жидкость, смесь изомеров.

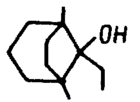
КАО (1985) вырабатывает продукт, имеющий $d_{20}^{20} 1,084 - 1,092$, n_D^{20} 1,478–1,484, т. всп. 94°C.

Запатентованный КАО способ синтеза предусматривает алкилирование гваякола этилинденнорборненом с последующим гидрированием (при одновременном гидрогенолизе метоксильного радикала) (Fujikura Y. и др., пат. США 4604488, 21.12.83 — 5.08.86, РЖХ, 1987, 9Р591П).

Пригоден для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

4.22. Гуминол

1,5-Диметил-8-этилбицикло-[3,2,1]октан-8-ол, Huminol (Dragoco). $C_{12}H_{20}O$; 180,29



Запах — очень сильный, подобный запаху свежевспаханной земли, геосмина (*транс*-1,10-диметил-*транс*-9-декалоола). Жидкость.

Продажный продукт Dragoco (1990) имеет чистоту ≥98% (ГЖХ); d_4^{20}0,956 – 0,966; n_D^{20} 1,480–1,490; т. всп. >100°C.

Запатентован способ многостадийного синтеза, исходя из диметилциклооктадиена (Brunke E.-J., Struwe H., заявка ФРГ 3128790, 21.07.81–10.02.83, РЖХ 1984,8Р545П). Обычно используется в виде 0,1%-ного раствора. Ввод в парфюмерные композиции и отдушки не превышает 0,5%.

4.23.-4.40. АЛЬДЕГИДЫ И АЦЕТАЛИ

4.23. 2,4-Диметилтетрагидробензальдегид

Смесь 2,4- и 3,5-диметил-3-циклогексен-карбальдегидов, 2,4-Dimethyl tetrahydrobenzaldehyde (Arc. 996), Triplal (IFF), Cyclal C (GIV), Vertocitral (H. + R.), Ligustral (Quest).

$C_9H_{14}O$; 138,21

CHO

C. A. 27939-60-2

Запах — очень сильный, зелени, травы, с нотой цитрусов. Жидкость, т. кип. 94–96°C/40 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 3,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	95	0,933–0,941	20/4	1,469–1,475	66
GIV, 1986	97	0,926–0,931	20/4	1,468–1,472	65
H. + R., 1988	97	0,932–0,937	25/25	1,471–1,474	72
Quest, 1989	96	0,935–0,941	20/20	1,471–1,475	62

Получают диеновой конденсацией 2-метил-1,3-пентадиена с акролеином.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%. Ограничений IRFA нет.

4.24. Гистидаль

Этиленгликольацеталь 2,4-диметилтетрагидробензальдегида, Histidal (Roure).

$C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

O O

Запах — свежей зелени, с оттенком запаха аниса, менее резкий, чем у исходного альдегида. Жидкость, т. кип. 110°C/33 гПа, смесь изомеров.

В соответствии со спецификацией Roure (1964) продажный продукт имеет d_{20}^{20}1,012 – 1,014; n_D^{20} 1,479–1,481.

Может быть получен ацетализацией диметилтетрагидробензальдегида этиленгликолем в присутствии кислотного катализатора.

Рекомендуется для использования в цветочных парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%.

4.25. Альгрин

Смесь 2,4- и 2,5-диметил-4-циклогексен-карбальдегидов, Cyclovertal (Henkel), Isohexenaldehyd (Miltitz).

$C_9H_{14}O_2$; 138,21

CHO

C. A. 68039-49-6

Запах — резкий, зелени, фруктов. Жидкость, т. кип. 92–93°C/33 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel: oral LD_{50} > 3,1 г/кг (мыши).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Henkel	~95 (ГЖХ)	~0,925	20/4	1,469–1,473	65
Miltitz, 1991	95 (оксим.)	0,928–0,935	20/20	1,468–1,472	67

Получают диеновой конденсацией изопрена с кротоновым альдегидом.

Используют главным образом в отдушках для синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%.

4.26. Изоциклоцитраль

2,4,6-Триметил-3-циклогексенилкарбальдегид и 3,5,6-триметил-3-циклогексенилкарбальдегид, Isocyclocitral (Arc. 761, RIFM, GIV, IFF), Neocyclocitral (H.+R.).

$C_{10}H_{16}O$; 152,24

C. A. 1335-66-6

Запах — сильный, свежей зелени, ноты вербены, цитрусов. Жидкость, смесь изомеров, т. кип. 81–82°C/16 гПа; 54°C/8 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,5 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	94 (ГЖХ)	0,918–0,924	20/4	1,468–1,472	79
IFF, 1992	94 (ГЖХ)	0,920–0,928	25/25	1,468–1,472	78
H.+R., 1988	90 (оксим.)	0,913–0,923	25/25	1,468–1,472	81

Получают диеновой конденсацией 2-метил-1,3-пентадиена с кротоновым альдегидом (П. П. Шорыгин, А. Р. Гусева, Журн. общ. хим. 1936, 6, № 10, с. 1569).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.27. 4-Третичнобутилциклогексилкарбальдегид

Racinal (Dragoco)

$C_{11}H_{20}O$; 168,28

Запах — зелени, земли, сильный. Жидкость.

Продажный продукт Dragoco (1985) содержит не менее 97% (оксим.) названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,908 – 0,918; n_D^{20} 1,463–1,473; т. всп. 103°C.

Используется в сравнительно небольшом числе парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

4.28. Циклональ

4(3)-(4-Метил-3-пентен-1-ил)-3-циклогексенкарбальдегид, 4-(4-Methyl-3-penten-1-yl)-3-cyclohexene-1-carboxaldehyde (Arc. 2162), Isohexenyl cyclohexenyl carboxaldehyde (RIFM), Cyclonal (РФ), Myrac aldehyde (IFF), Myraldene (GIV), Empetal (Quest), Vertomugal (H.+R.), Synflor (Dragoco).

$C_{13}H_{20}O$; 192,30

C. A. 37677-14-8

Запах — цветочный, ноты зелени, ландыша, фруктов. Жидкость, т. кип. 142–144°C/10,7 гПа; 120°C/6,7 гПа; смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	96 (ГЖХ)	0,927–0,935	20/4	1,488–1,492	98
GIV, 1984	98 (ГЖХ)	0,929–0,934	20/4	1,489–1,492	>100
Quest, 1989	96 (ГЖХ)	0,931–0,935	20/20	1,489–1,492	98
H.+R., 1988	98 (оксим.)	0,928–0,933	25/25	1,488–1,492	>100
Dragoco, 1990	90 (ГЖХ)	0,928–0,938	20/4	1,486–1,496	>110
РФ, 1990	97 (оксим.)	~ 0,930	20/4	1,489–1,492	—
КНР, 1990	96 (ГЖХ)	0,927–0,933	25/25	1,489–1,492	93

Получают диеновой конденсацией мирцена с акролеином.

Используют в парфюмерных композициях и в большом ассортименте отдушек различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.29. Мирценаль

1-Метил-4-(4-метил-3-пентен-1-ил)-3-циклогексенкарбальдегид (Arc. 2115), Myrcenal (РФ), Precyclemone B (IFF), — $C_{14}H_{22}O$; 206,33

С. А. 52474-60-9

Запах — сильный, освежающий, ноты зелени, фруктов. Жидкость, т. кип. 110–115°С/5,3 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ: oral LD_{50} > 6 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание альдегидов, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
РФ, 1990	98 (оксим.)	~0,920	1,485–1,487	117
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,915–0,923	1,483–1,488	>100

Получают диеновой конденсацией мирцена с метилакролеином (Мелешкина Г. В., Скворцова Н. И., Труды ВНИИСНДВ, вып. VI, 1963, с. 21). Возможно также осуществить вариант, при котором метилакролеин образуется и расходуется одновременно с диеновым синтезом взаимодействием формальдегида с пропионовым альдегидом (Hall J. B., пат. США 3929895, 22.04.74–30.12.75, РЖХ, 1976, 19Р482П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.30. Верналъдегид

1-Метил-4-(4-метилпент-1-ил)-3-циклогексенкарбальдегид, Vernaldehyde (GIV). — $C_{14}H_{24}O$; 208,34

С. А. 66327-54-6

Запах — свежей зелени, альдегидный. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 93% (ГЖХ) суммы изомеров названного альдегида и имеет d_4^{20} 0,892 – 0,899; n_D^{20} 1,464–1,469; т. всп. 78°С.

Получают селективным каталитическим гидрированием мирценаля.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.31. Лираль

4(3)-(4-Гидрокси-4-метилпент-1-ил)-3-циклогексенкарбальдегид, 4-(4-Hydroxy-4-methyl pentyl)-3-cyclohexenecarboxaldehyde (Arc. 1754), Lyral (IFF), Kovanol (TAK). — $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

С. А. 31906-04-4;
51414-25-6

Запах — приятный цветочный, нота ландыша, стойкий. Жидкость, т. кип. 120–121°С/1,3 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} > 5 г/кг, derm. LD_{50} > 5 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	98	0,990–0,998	20/4	1,486–1,493	>100
TAK, 1987	97	0,984–0,998	25/25	1,487–1,494	156

Может быть получен, как это было впервые сделано, диеновой конденсацией мирценола с акролеином (Teegarden R. W., Steinbach L., пат. США 2947780, 2.08.60, РЖХ, 1962, 13Н418). Лучшим является диеновый синтез с применением катализаторов (Sanders J. M. и др., пат. США 4007137, 7.10.75–8.02.77, РЖХ, 1977, 20Р592П):

$$\xrightarrow[\text{[ZnCl}_2\text{]}]{\text{CH}_2\text{=CH–CHO}}$$

Имеется ряд патентов на получение лираля гидратацией циклонала. Продукт находит все более широкое применение в парфюмерных композициях и отдушках. Дозировка — до 20%. Ограничений IFRA нет. В последнее время стал использоваться для частичной замены гидроксицитронеллаля.

4.32. Циклоциклональ

8,8-Диметил-2(3)-формилоктагидронафталин, Cyclemone A (IFF), Aldehyde 111 (Dragoco), Cyclomyral (PFW). $C_{13}H_{20}O$; 192,30

C. A. 68991-97-9

Запах — свежий, оригинальный, ноты зелени, морского бриза. Жидкость, т. кип. 94°C/4 гПа, смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание суммы изомеров, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	95 (ГЖХ)	0,993–1,001	20/4	1,502–1,508	>100
Dragoco	98 (оксим.)	0,984–0,988	20/4	1,503–1,507	>110
PFW, 1985	97 (оксим.)	~0,989	20/20	~1,505	>100
KHP, 1989	85	0,974–0,988	25/25	1,502–1,507	93

Может быть получен циклизацией циклонала действием фосфорной кислоты в сравнительно мягких условиях (толуол, 45°C; Light K. K. и др., пат. США 4782192, 24.06.82–1.11.88, РЖХ 1989, 21P2043).

Рекомендуется применять в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.33. Джунипаль

7,9,9-Триметил-4(5)-формил-бицикло[4,3,0]-1-нонен, Junipal (Henkel). $C_{13}H_{20}O$: 192,30

Запах — сильный, травянистый, ноты туйи, можжевельника, нюанс черной смородины. Жидкость, т. кип. 84–88°C/0,4 гПа.

Продажный продукт Henkel содержит ~95% (ГЖХ) смеси изомеров названного альдегида и имеет $d_{25}^{25} \sim 0,965$; n_D^{20} 1,489–1,493; т. всп. >100°C. Может быть получен из 2,2,4-триметилциклопентанона последовательно: взаимодействием с винилмагнийбромидом, дегидратацией и диеновым синтезом образующегося диена с акролеином (Bruns K., Weber U., заявка ФРГ 3212326, 2.04.82–6.10.83., РЖХ, 1984, 24P599П).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.34. Хризанталь

5-Пропил-6-формил-2-норборнен, 3-пропилбицикло-[2,2,1]-5-гептен-2-карбальдегид, 3-Propylbicyclo[2,2,1]hept-5-ene-2-carboxaldehyde (RIFM), Chrysanthal (Naarden-Quest). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

C. A. 39067-39-5

Запах — сильный, цветов (хризантемы) и зелени, свежий. Жидкость, т. кип. 90°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} 4,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 92% (ГЖХ) названного альдегида и имеет $d_{20}^{20} 0,968-0,972$; n_D^{20} 1,479–1,482; т. всп. 79°C.

Получают диеновым синтезом из циклопентадиена и 2-гексеналя.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 0,5%. Ограничений IFRA нет.

4.35. Мацеаль

2-Метил-5-изопропил-7-формил-бицикло-[2,2,2]-2-октен, Maceal (Quest). $C_{13}H_{20}O$; 192,30

С. А. 67845-30-1

Запах — очень сильный, свежий, нота зелени, пряный. Жидкость.

Продажный продукт Quest (1989) имеет d_{20}^{20} 0,956–0,964; n_D^{20} 1,485–1,487; т. всп. >50°С.

Может быть получен диеновым синтезом из *альфа*-фелландрена и акролеина.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 0,5%. Ограничений IFRA нет.

4.36. Гликольераль

Этиленгликольацеталь 2-метил-5-изопропил-7-формилбицикло-[2,2,2]-2-октена, Glycolierral (Roure). $C_{15}H_{24}O_2$; 236,36

Запах — зелени, листьев, с цветочной и древесной нотами. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} 1,013–1,016; n_D^{20} 1,490–1,492; т. всп. ~140°С.

Получают ацетализацией этиленгликолем соответствующего альдегида (см. мацеаль).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.37. Формилтрициклодекан

I. 8-Формилтрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-декан (Vertral — Dragoco), С. А. 84012-43-1. $C_{11}H_{16}O$; 164,25

II. 4(3)-Формилтрицикло[5,2,1,$0^{2,6}$]-декан (Melozone — IFF), С. А 30772-79-3.

I II

Запах — свежей зелени, у изомера II — нота запаха зеленой дыни.

Vertral (I) — содержит минимум 95% (ГЖХ) альдегидов (сумма двух изомеров) и имеет d_4^{20} 1,037–1,047; n_D^{20} 1,498–1,508; т. всп. 98°С.

Melozone (II) содержит не менее 90% (ГЖХ) альдегидов и имеет d_4^{20} 1,027–1,037; n_D^{20} 1,498–1,504; т. всп. >100°С.

Могут быть получены гидроформилированием трициклодецена.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10% Ограничений IFRA нет.

4.38. Диэтилацеталь формилтрициклодецена

Диэтилацеталь 8-формилтрицикло-[5, 2, 1, $0^{2,6}$]-3-децена, Talia (IFF). $C_{15}H_{24}O_2$; 236,36

С. А. 67633-92-5

Запах — сильный, фруктово-цветочный. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) ацеталя и имеет d_4^{20} 0,990–0,998; n_D^{20} 1,480–1,490; т. всп. > 100°С.

Получают гидроформилированием дициклопентадиена и последующей ацетализацией.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.39. Метоксиформилтрициклодекан

8(9)-Метокси-3(4)-формилтрицикло-[5, 2, 1, $0^{2,6}$]-декан, Methoxy dicyclopentadiene aldehyde (Arc. 1872), Scentenal (Firm.) $C_{12}H_{18}O_2$ 194,27

С. А. 86903-90-9

Запах — свежий, морского бриза, цветочный. Жидкость. т. кип. 92–100°С/2,7 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным Firm. oral LD_{50} 2,8 г/кг.

38-5414

Продажный продукт Firm. (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) смеси четырех изомеров названного метоксиальдегида и имеет d_{20}^{20} 1,070–1,079; n_D^{20} 1,490–1,500; т. всп. >100°C.

Получают гидроформилированием метокситрициклодецена.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

4.40. Трициклодецилиденбутаналь

4-(Трицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-децил-8-иден)-бутаналь, Dupical (Naarden-Quest). $C_{14}H_{20}O$; 203,31

C.A. 30168-23-1

CHO

Запах — интенсивный, цветочный (ландыша), с альдегидным нюансом. Жидкость, т. кип. 110°C/4 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985): oral LD_{50} 2–5 мл/кг (крысы).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 1,000–1,011; n_D^{20} 1,506–1,513; т. всп. 102°C.

Может быть получен из винилтрициклодецилового спирта (англ. пат. 1281813, 3.02.70–19.07.72) взаимодействием с винилэтиловым эфиром при катализе *пара*-толуолсульфокислотой.

OH → CHO

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.41–4.87. КЕТОНЫ И КЕТАЛИ

4.41. Метилциклопентенолон

2-Гидрокси-3-метил-2-циклопентенон, Methyl cyclopentenolone (Arc. 1987), Cyclotene. $C_6H_8O_2$; 112,13

C. A. 80-71-1

OH
O

Запах — сильный, карамельно-пряный. Кристаллы, т. пл. 106°C, образует кристаллогидрат с одним молем воды.

Получают из древесной (буковой) смолы путем щелочной обработки и фракционированной вакуум-перегонки для разделения смеси метилциклопентенолон—мальтол.

Используют главным образом в пищевых ароматических эссенциях. Изредка вводится в парфюмерные композиции. Ограничений IFRA нет.

4.42. Пентилциклопентанон

2-Пентилциклопентанон, Delphone (Firm.). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

C. A. 4819-67-4

O

Запах — цветочно-фруктовый, сильный, ноты жасмина, сельдерея, груши. Жидкость, т. кип. 85°C/13,3 гПа.

Продажный продукт Firm (1980, 1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) 2-пентилциклопентанона и имеет d_{20}^{20} 0,887–0,893; n_D^{20} 1,446–1,450; т. всп. 86°C.

Может быть получен селективным каталитическим гидрированием 2-пентилиденциклопентанона — полупродукта синтеза гедиона.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.43. Гексилциклопентанон

2-Гексилциклопентанон, 2-Hexyl cyclopentanone (Arc. 1658), Jasmatone (Quest). $C_{11}H_{20}O$; 168,28

C. A. 95-41-0

O

Запах — сильный, цветочный (жасмина), с фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 118°C/13,3 гПа.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 96% (ГЖХ) гексилциклопентанона и имеет d_4^{20} ~ 0,889; n_D^{20} ~1,451; т. всп. 98°C.

Может быть получен конденсацией гексаналя с циклопентаноном и последующим селективным гидрированием ненасыщенного кетона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.44. Гептилциклопентанон

2-Гептилциклопентанон, 2 n-Heptyl cyclopentanone (Arc. 1534, RIFM), Alismone (GIV), Fleuramone (IFF), Projasmon P (H.+R.), Frutalone (PFW) — $C_{12}H_{22}O$; 182,31

C. A. 137-03-1

Запах — цветочно-фруктовый, с нотой жасмина. Жидкость, т. кип. 159°C/21 гПа; 130°C/13 гПа.

Острая токсичность по RIEM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг(кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп, °C
GIV, 1961	97 (оксим.)	0,877–0,887	25/25	1,450–1,454	–
IFF, 1992	96 (ГЖХ)	0,880–0,888	20/4	1,450–1,454	>100
H.+R., 1988	98 (оксим.)	0,881–0,886	25/25	1,450–1,455	>100
PFW, 1983	98 (оксим.)	0,880–0,890	20/20	1,451–1,455	>100

Традиционный метод получения — конденсация энантового альдегида с циклопентаноном и последующее селективное каталитическое гидрирование. Может быть получен также радикальным присоединением 1-гептена к циклопентанону (Сулейманова Э. Т. и др., Нефтехимия, 1979, 19, с. 815, РЖХ, 1980, 19Ж162).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 4%. Ограничений IFRA нет.

4.45. Изожасмон

2-Гексил-2-циклопентенон, 2-n-Hexyl-2-cyclopenten-1-one (Arc. 1659), Isojasmone (RIFM, GIV, Quest, BASF). — $C_{11}H_{18}O$; 166,26

C. A. 95-41-0; 11050-62-7

Запах — цветочный (жасмина), с нотами фруктов, зелени Жидкость, т. кип. 144°C/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978). oral. LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	80 (оксим.)	0,908–0,920	25/25	1,475–1,480	>100
Quest, 1989	85 (ГЖХ)	0,915–0,921	20/20	1,472–1,477	105
BASF, 1988	80 (ГЖХ)	0,910–0,920	25/25	1,472–1,477	104
РФ*, 1990	70 (оксим.)	0,909–0,922	20/4	1,468–1,475	85

* В РФ вырабатывается под названием "дигидрожасмон".

Получают действием фосфорной кислоты на ундециленовую кислоту с последующим тщательным разделением полученной смеси.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.46. *цис*-Жасмон

3-Метил-2-(*цис*-2-пентенил)-2-циклопентенон, *cis*-Jasmone (Arc. 1788, RIFM, Roure, TAK). — $C_{11}H_{16}O$; 154,25

C. A. 488-10-8

Содержится в ЭМ крупноцветного жасмина, нероливом, лавандовом и др. Запах — подобный запаху жасмина.

Жидкость, т. кип. 248°C/1013 гПА; 134–135°C/16 гПа; 109°C/8 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} ~5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Roure	–	~ 0,941	~1,498	121
TAK, 1987	98	0,940–0,950	1,495–1,505	116

Может быть получен из 3-метил-2-циклопентенона алкилированием *цис*-2-пентенилхлоридом в среде раствора щелочи при катализе фазового переноса.

Из-за дороговизны используется в сравнительно небольшом числе парфюмерных композиций Ограничений IFRA нет.

4.47. Дигидрожасмон

3-Метил-2-пентил-2-циклопентенон, Dihydro jasmone (Arc. 954, RIFM, Quest, TAK), Dijasmone (IFF). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

C. A. 1128-08-1; 68411-18-7

Запах — свежий, цветочный, жасмина, с фруктовыми нотами. Жидкость, т. кип. 230°C/1013 гПа; 101-102°C/6,7 гПа; 87-88°C/2,7 гПа; смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Quest, 1989	90	0,915-0,919	20/20	1,478-1,482	104
TAK, 1987	94	0,912-0,916	25/25	1,478-1,482	121
IFF, 1992	90	0,910-0,918	25/25	1,474-1,478	>100

Продажный продукт IFF содержит: 10-30% дигидрожасмона, 20-40% ундекан-2,5-диона, 10-30% 5-пентил-3-метил-2-циклопентеиона, 20-40% 3-пентил-4-метил-2-циклопентенона.

Один из способов получения дигидрожасмона состоит во внутримолекулярной альдольной конденсации 2,5-ундекандиона, который в свою очередь может быть получен взаимодействием энантового альдегида с метилвинилкетоном в присутствии солей тиазолия (Stetter H., Kuhlmann H., Tetrahedron Lett. 1974, № 51-52, 4505, РЖХ, 1975, 11Ж123).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.48. Пренжасмон

3-Метил-2-пренил-2-циклопентенон, Prenjasmon (Wacker). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

C. A. 61900-44-5

Запах — цветочный (жасмина) с пряной и цитрусовой нотами. Жидкость, т. кип. 60°C/0,01 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~90% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} ~0,964; n_D^{20}1,500-1,510; т. всп. 97°C.

Получают, по всей вероятности, алкилированием 3-метил-2-циклопентенона действием пренилхлорида в присутствии катализатора фазового переноса.

Рекомендуется для парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

4.49. Велютон

2,5,5-Триметил-2-пентилциклопентанон, Veloutone (Firm.). $C_{13}H_{24}O$; 196,33

C. A. 65443-14-3

Запах — цветочно-фруктовый, ноты жасмина, персика, абрикоса. Жидкость, т. кип. 100-105°C/20 гПа, 35°C/0,13 гПа.

Продажный продукт Firm содержит, по данным 1979 г., не менее 80% (ГЖХ) названного кетона и имеет (1992) d_{20}^{20} 0,865-0,872; n_D^{20} 1,442-1,446; т. всп. 90°C.

Получают алкилированием 2-пентилциклопентанона галоидным метилом (Dastur K. P., швейц. пат. 613619, 13.05.76-15.10.79, РЖХ 1980, 10Р582П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

4.50. Магнолион

3-(2-Оксопропил)-2-пентилциклопентанон, 3-ацетонил-2-пентилциклопентанон, Pentylcyclopentanonepropanone (RIFM), Magnolione (Roure). $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

C. A. 40942-73-2

Запах—приятный цветочный, магнолии. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} ~ 0,961; n_D^{20} ~ 1,463; т. всп. 153°С.

Получают взаимодействием 2-пентил-2-циклопентенона с ацетоуксусным эфиром и последующими гидролизом и декарбоксилированием образующегося кетоэфира (франц. пат. 2151523, 1.09.71–20.04.73, РЖХ, 1974, 12Р432П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.51. Метилжасмонат

Метил-2-(2-*цис*-пентенил-циклопентан-1-он-3-ил)-ацетат, Methyl jasmonate (Arc. 2093, Firm.).

$C_{13}H_{20}O_3$; 224,30

С. А. 1211-29-6; 39924-52-2

Содержится в ЭМ жасмина.

Запах — приятный, цветов жасмина. Жидкость, т. кип. 116–118°С/2,7 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Firm., по данным каталога 1981 г., содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы изомеров названного соединения. Он имеет (1992) d_{20}^{20} 1,022–1,028; n_D^{20} 1,473–1,477; т. всп. >100°С.

Известные методы получения мало пригодны для крупного промышленного производства (Näf F., Decorzant R., Helv. chim. acta, 1978, 61, № 7, с. 2524).

Поэтому метилжасмонат остается весьма дорогим и используется главным образом в парфюмерных композициях для духов и туалетных вод высших сортов. Ограничений IFRA нет.

4.52. Гедион

Метилдигидрожасмонат, метиловый эфир 2-пентилциклопентанон-3-илуксусной кислоты, Methyl hydrojasmonate (Arc. 2076), Hedion (Firm.). Methyl dihydrojasmonate (Quest).

$C_{13}H_{22}O_3$; 226,32

С. А. 24851-98-7

Запах — сильный, цветочный, жасмина с цитрусовой нотой. Жидкость, т. кип. 85–86°С/0,7 гПа, смесь пространственных изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Firm., 1983, 1992	96	0,998–1,006	1,457–1,462	>100
Quest., 1989	96	~1,001	~ 1,460	>100

Промышленный синтез гедиона, объем производства которого достиг 1000 т в год, был разработан в начале 60-х годов Э. Дэмолем и Э. Ледерером (пат. ФРГ 1150483, 21.02.60–9.01.64; Demole E. и др., Helv. chim. acta, 1962, 45, № 2, 685) и освоен на предприятиях Firm. Он включает: альдольную конденсацию пентаналя с циклопентаноном, изомеризацию продукта конденсации под действием кислотных катализаторов, конденсацию с малоновым эфиром по Михаэлю и превращение диэфира в метилдигидрожасмонат.

Используется во все большем ассортименте парфюмерных композиций при дозировке до 25%. Довольно низкая цена позволяет с успехом использовать гедион в отдушках для мыла высших сортов и косметики. Ограничений IFRA нет.

4.53. Дигидроизожасмонат

Метиловый эфир 2-гексил-3-оксоциклопентанкарбоновой кислоты, Dihydro isojasmonate (PFW). $C_{13}H_{22}O_3$; 226,32

С. А. 37172-53-5

Запах — зелени и жасмина, резкий. Жидкость, т. кип. 85°C/0,08 гПа.

Продажный продукт PFW (1983) должен содержать не менее 98% (ГЖХ) названного эфира и иметь d_{20}^{20} 0,991–0,999; n_D^{20} 1,456–1,460; т. всп. >100°C.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. В некоторых композициях эффективно введение малых доз порядка 0,1%. Ограничений IFRA нет.

4.54. Криптон

4-Изопропил-2-циклогексенон, *para*-iso-Propyl-2-cyclohexenone (Arc. 2694), Crypton (BASF) $C_9H_{14}O$; 138,21

Содержится в ЭМ некоторых видов эвкалипта, а также в лавандовом и лавандиновом ЭМ.

Запах — травянистый с древесной и жирной нотами. Жидкость, т. кип. 222–228°C/1013 гПа, 98–100°C/133 гПа.

Продажный продукт BASF (1983) содержит не менее 97% (ГЖХ) криптона и имеет d_4^{20} 0,939–0,945; n_D^{20} 1,480–1,485; т. всп. 98°C. Используют в ограниченном числе парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

4.55. Вторичнобутилциклогексанон

2-(1-Метилпропил)-циклогексанон, *ortho*-sec.Butyl cyclohexanone (Arc. 434). Frescomenthe (GIV). $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 14765-30-1

Запах — свежий, мятно-древесный. Жидкость, т. кип. 91°C/14,6 гПа; 48°C/0,9 гПа.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,912–0,916, n_D^{20} 1,457–1,461; т всп. 82°C.

Может быть получен каталитическим гидрированием 2-втор-бутилфенола (Dankert L. J., Permoda D. A., пат. США 3124614, 7.04 58–10.03.64, РЖХ, 1965, 17Н115П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 6%. Ограничений IFRA нет.

4.56. 2-Третичнобутилциклогексанон

ortho-tert. Butyl cyclohexanone (Arc. 435), Verdone (IFF) $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 1728-46-7

Запах — сильный мятный, вкус — холодящий. Жидкость, т. кип. 56°C/2,7 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,907–0,915; n_D^{20} 1,454–1,459; т. всп. 75°C.

Получают каталитическим гидрированием *орто*-трет. бутилфенола или окислением 2-трет. бутилциклогексанола (Г. И. Молдованская и др., Труды ВНИИСНДВ, вып. VI, 1963, с. 29).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.57. 4-Третичнобутилциклогексанон

пара-трет. Бутилциклогексанон, *para*-tert. Butyl cyclohexanone (Arc. 436, IFF), *p*-tert. Butylcyclohexanone (RIFM) $C_{10}H_{18}O$; 154,25

С. А. 98-53-3

Запах — камфарно-древесный с оттенком запаха пачули. Кристаллы, т. пл. 49–50°C.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50}>5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) 4-трет.бутилциклогексанона и имеет т. пл ⩾ 47°C, т. всп. 89°C.

Может быть получен окислением 4-трет. бутилциклогексанола (В. М. Родионов и др., Труды ВНИИСНДВ, 1952, вып 1, с. 38) или селективным каталитическим гидрированием 4-трет бутилфенола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.58. 4-Третичноамилциклогексанон

пара-трет. Амилциклогексанон, *para*-tert. Amyl cyclohexanone (Arc. 166), 4-tert. Amylcyclohexanone (RIFM), Orivone (IFF), Irivone (Dragoco)

$C_{11}H_{20}O$; 168,28

С. А. 16587-71-6

Запах — древесно-камфарный с нотой ириса. Жидкость, т. кип. 82–83°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 4,7 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальное содержание п-изомера, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	95	93	0,919–0,927	1,466–1,471	>100
Daragoco	95	–	0,920–0,925	1,466–1,470	>100

Может быть получен окислением 4-трет. амилциклогексанола (Л. А. Хейфиц и др., Журн. общ. хим., 1962, **32**, № 5, с. 1467) или селективным каталитическим гидрированием 4-трет. амилфенола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

4.59. Ветинон

4-Метил-2-(1,1,2-триметилпропил)-циклогексанон, 4-Methyl-2-isohexyl-cyclohexanone-1 (Arc. 2062), Vetinon (РФ)

$C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах — древесно-ирисовый. Жидкость, т. кип. 102–103°C/6,7 гПа; d_4^{20} 0,913; P_{20} $1{,}8\cdot10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ (1992): oral LD_{50} 7,8 г/кг.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 93% названного кетона и имеет n_D^{20} 1,468–1,469; т. всп. 92°C.

Промышленный синтез ветинона осуществляют путем алкилирования *пара*-крезола 2,3-диметилбутеном, гидрирования полученного алкилфенола до алкилциклогексанола и каталитического дегидрирования последнего на медьсодержашем катализаторе (Л. А. Хейфиц и др., Журн. общ. хим., Сб. Проблемы орг. синтеза, 1965, с. 129; Масложировая пром-сть, 1976, № 7, с. 32).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

4.60. Ирилон

2-Метил-4-(1,1,2-триметилпропил)-циклогексанон, 2-Methyl-4-isohexyl-cyclohexanone-1 (Arc. 2061), Irilon (РФ)

$C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах — мускусный с ирисовой нотой. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. пл. 38,5–39,5°C; т. кип. 123–125°C/6,7 гПа; P_{20} $6{,}7\cdot10^{-3}$ гПа.

Продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 90% названного кетона и имеет n_D^{20} 1,474–1,476. Промышленный синтез ирилона осуществляют путем алкилирования *орто*-крезола 2,3-диметилбутеном, гидрирования полученного алкилфенола и каталитического дегидрирования алкилциклогексанола до кетона:

(Л. А. Хейфиц и др., Журн. общ. хим., Сб. Проблемы орган. синтеза, 1965, с. 129; Масло-жировая пром-сть, 1976, № 7, с. 32).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

4.61. Ливескон

3-Метил-5-пропил-2-циклогексенон, 3-Methyl-5-propyl-2-cyclohexenone (Arc. 2215), Livescone (Roure), Gravenone (Dragoco), Celery ketone.

$C_{10}H_{16}O$; 152,24

С. А. 3720-16-9

Запах — травянистый, пряный, нота сельдерея. Жидкость.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure	-	~0,926	20/20	~1,483	113
Dragoco, 1990	98	0,921–0,931	20/4	1,478–1,488	110

Может быть получен взаимодействием масляного альдегида с двумя молями ацетоуксусного эфира в присутствии третичного амина при последующей дегидратации и далее при полном декарбэтоксилировании (ср. каликсол 4.66).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

4.62. Камфоленилиденбутанон

3-Камфоленилиденбутан-2-он, 3-метил-5-(2,2,3-триметил-3-циклопентенил)-3 пентен-2-он, Sandex (GIV).

$C_{14}H_{22}O$; 206,33

С А 65113-95-3

Запах — древесный, подобный запаху ионона Жидкость, смесь изомеров, т. кип. 102–105°С/1,7 гПа.

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 80% (ГЖХ) суммы изомеров названного кетона и имеет d_4^{20} 0,918–0 926, n_D^{20} 1,485–1,492; т. всп. >100°С.

Получают альдольиой конденсацией камфоленового альдегида с метилэтилкетоном.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

Является полупродуктом синтеза 3-камфоленилбутан-2-ола — Sandalor (4.13).

4.63. Ветиверкетон

4-Метил-4-циклогексилпентан-2-он, Vetivertone (Naarden), Vetival (Dragoco).

$C_{12}H_{22}O$; 182,31

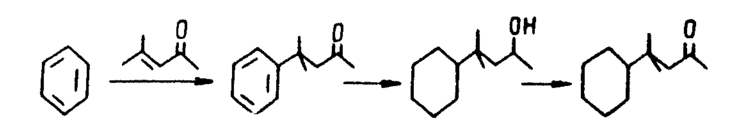
С. А. 4927-39-3

Запах — древесный с нотой ветиверового масла. Жидкость, т. кип. 239–240°С/1013 гПа; P_{20} $3{,}5\cdot10^{-2}$ гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп, °С
Naarden, 1977	90 (ГЖХ)	0,915–0,921	20/20	1,466–1,469	117
Dragoco, 1990	95 (ГЖХ)	0,912–0,918	20/4	1,466–1,469	107
РФ, 1990	86 (оксим.)	~0,920	20/4	1,468–1,488	-

Промышленный метод синтеза состоит в конденсации бензола с мезитилоксидом, гидрировании продукта конденсации до соответствующего спирта, дегидрированием или окислением которого получают ветиверкетон:



Трудности экологического характера (работа с бензолом и $AlCl_3$) препятствуют созданию крупного производства. Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.64. Метилциклоцитрон

1-Ацетил-2,4,6-триметил-3-циклогексен, Methyl cyclocitrone (IFF) — $C_{11}H_{18}O$; 166,26

C. A. 68480-14-8

Запах свежей зелени с цветочными нотами. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 85% (ГЖХ, основной пик) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,910–0,918; n_D^{20} 1,466–1,471; т. всп. 83°С.

Может быть получен диеновой конденсацией 2-метил-1,3-пентадиена с 3-пентен-2-оном.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.65. Иритон

4-(2,4,6-Триметил-3-циклогексен-1-ил)-3-бутен-2-он, 4-(2,4,6-Trimethyl-3-cyclohexenyl)-3-buten-2-one (Arc. 3002), Iritone (IFF). — $C_{13}H_{20}O$; 192,30

C. A. 67801-38-1

Запах — мягкий бальзамический, ноты ириса, амбры. Жидкость, т. кип. 99–100°С/4 гПа, смесь изомеров. Продажный продукт IFF

(1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) смеси изомерных кетонов и имеет d_4^{20} 0,916–0,926; n_D^{20} 1,492–1,496; т всп. > 100°С.

Получают альдольной конденсацией изоциклоцитраля с ацетоном (П. П. Шорыгин, А. Р. Гусева, Журн. общ. хим., 1936, 6, № 10, с. 1569). Изомерный состав зависит от изомерного состава изоциклоцитраля.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.66 Каликсол

4-Карбэтокси-3-метил-5-пентил-2-циклогексенон, Calyxol (Quest). — $C_{15}H_{24}O_3$; 252,26

C. A. 59151-19-8

Запах — тонкий цветочный (жасмина) с нотами жимолости, персика. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного соединения и имеет d_{20}^{20} ~ 0,993; n_D^{20} ~ 1,478; т. всп. > 100°С.

Может быть получен взаимодействием гексилового альдегида с двумя молями ацетоуксусного эфира в присутствии третичного амина при последующих дегидратации и декарбоксилировании (Berthold R. и др., заявка ФРГ 2654840, 3.12.76–8.06.78, РЖХ, 1979, 4Н53П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.67. Кефарен

Смесь кетонов и еноловых простых эфиров, в том числе 1-ацетил-4-метокси-2,2,6,6-тетраметил-3-циклогексен и 3,3,5,5-тетраметил-4-(1-метоксивинил)циклогексанон, Kefarene (Roure). — $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

Запах — свежий, напоминает запах бутонов розы. Жидкость, реакционная смесь.

Продажный продукт Roure имеет $d_{20}^{20} \sim 0{,}972$; $n_D^{20} \sim 1{,}478$; т. всп. 113°С.

Получают, по всей вероятности, способом, аналогичным синтезу кефалиса (см. 4.68), но с использованием метилового эфира *орто*-муравьиной кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.68. Кефалис

3,3,5,5-Tetramethyl-4-ethoxyvinylcyclohexanone (RIFM), Kephalis (Roure). $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34

C. A. 36306-87-3

Запах — амброво-древесный, стойкий. Жидкость, реакционная смесь. Острая токсичность по RIFM (1982): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт Roure имеет $d_{20}^{20} \sim 0{,}947$; $n_D^{20} \sim 1{,}475$; т. всп. 126°С.

Получают из мезитилоксида действием этилового эфира *орто*-муравьиной кислоты и эфирата трехфтористого бора. Недавно установлено, что на запах оказывает влияние наличие в реакционной смеси 0,5% 3,5,7,7-тетраметилциклоокта-2,4-диенона (Bajgrowicz J. A. и др., 12th Intern. Congr. Flavors, Fragr., Ess. Oils, Vienna, Austria, October 4-8, 1992, c. 8).

В составе коммерческого продукта идентифицировано 17 компонентов. В течение многих лет кефалис используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.69. Хинокитиол

бета-Туйаплицин, 4-изопропилтрополон, 2-гидрокси-4-изопропил-2,4,6-циклогептатриен-1-он, Hinokitiol (TAK). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C. A. 499-44-5

Содержится в ЭМ *Hinoki* (Тайвань), туйи, кипариса и др

Запах — фенольно-древесный. Кристаллы, т. пл. 52-53°С; т. кип. 140°С/13,3 гПа.

Острая токсичность, по данным TAK (1987): oral LD_{50} 0,8 г/кг (мыши).

Продажный продукт TAK (1987) содержит не менее 98% (анализ по УФ-спектру) названного соединения и имеет т. пл. 48-53°С.

Может быть выделен из ЭМ путем обработки водным раствором щелочи и последующего образования комплекса с солями меди.

Рекомендуется для использования в отдушках для зубных паст и некоторых пищевых ароматических эссенциях.

4.70. Диэтилкеталь циклогексанона

1,1-Диэтоксициклогексан, Rhumacetal (Roure). $C_{10}H_{20}O_2$; 172,27

Запах — приятный, фруктово-пряный и древесно-табачный. Жидкость, т. кип. 75-76°С/17 гПа; 65°С/12 гПа.

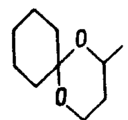
Продажный продукт Roure имеет $d_{20}^{20} \sim 0{,}914$; $n_D^{20} \sim 1{,}436$; т. всп. 66°С.

Может быть получен взаимодействием циклогексанона с этиловым эфиром *орто*-муравьиной кислоты в присутствии кислотного катализатора (Р. Я. Левина и др., Журн. общ. хим., 1941, **11**, № 7, с. 567).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.71. 1,3-Бутиленгликолькеталь циклогексанона

2-Метил-1,5-диоксаспиро-[5,5]-ундекан, Hersage (Quest), Heridone (Dragoco). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25



C. A. 6413-26-9

Запах — травянисто-пряный. Жидкость.

Коммерческие продукты

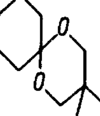
Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Quest, 1989	98	0,990-0,994	20/20	1,461-1,465	77
Dragoco, 1990	98	0,988-0,998	20/4	1,457-1,467	78

Может быть получен взаимодействием циклогексанона с 1,3-бутандиолом в присутствии кислотного катализатора.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.72. Неопентилгликолькеталь циклогексанона

3,3-Диметил-1,5-диоксаспиро-[5,5]-ундекан, Thymoxane (BBA). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28



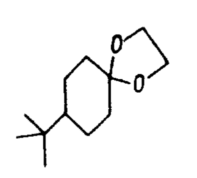
Запах дегтя и кожи. Жидкость, т. кип. 108°С/26,7 гПа.

Продажный продукт BBA (1990) содержит ~ 99,6% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_{20}^{20} ~ 0,982; n_D^{20} ~ 1,464; т. всп. 90°С.

Может быть получен взаимодействием циклогексанона и 2,2-диметилпропан-1,3-диола (неопентилгликоля) в присутствии кислотного катализатора (В. А. Криворучко и др., Пищевая пром-сть, 1990, № 2, с. 54). Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.73. Кипреналь

Этиленгликолькеталь 4-трет. бутилциклогексанона, 8-трет. бутил-1,4-диоксаспиро-[4,5]-декан, Animalex, Kyprenal (РФ). $C_{12}H_{22}O_2$; 198,31



Запах — древесно-мускусный, стойкий. Жидкость, т. кип. 116°С/9,3 гПа, 86-88°С/1,3 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 85% названного кеталя и имеет n_D^{20} 1,464-1,465. Получают взаимодействием 4-трет. бутилциклогексанона с этиленгликолем в присутствии кислотного катализатора (Hennis H. E., Rosenbrock E. H., пат. США 2993055, 8.07.61, РЖХ, 1962, 15Н354; Хейфиц Л. А. и др., Журн. ВХО им. Менделеева, 1964, 9, № 6. с. 706).

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

4.74. 1,2-Гексиленгликолькеталь циклопентанона

2-Бутил-1,4-диоксаспиро-[4,4]-нонан, Jasmonan (Henkel). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

C. A. 78649-62-4

Запах жасмина, с грибной нотой. Жидкость, т. кип. 95°С/19,5 гПа.

Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% (ГЖХ) названного кеталя и имеет d_{25}^{25} ~ 0,944; n_D^{20} 1,447-1,450; т. всп. 95°С.

Может быть получен ацетализацией циклопентанона 1,2-гексиленгликолем в присутствии кислотного катализатора (Schaper U.-A. и др., заявка ФРГ 2945049, 8.11.79–21.05.81, РЖХ, 1982, 9Р554П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

4.75. Изопропилдекалон

6-Изопропил-2-декалон, 6-изопропилоктагидро-2-(1Н)-нафталенон, 6-Isopropyl-2(1H)-octahydronaphtalenone (RIFM), Decatone (GIV). $C_{13}H_{22}O$; 194,32

C. A. 34131-98-1

Запах — фруктовый, цитрусовый, древесный. Жидкость, смесь изомеров, т. кип. 88-89°С/0,5 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомеров изопропилдекалона и имеет d_4^{20} 0,956-0,963; d_{25}^{25} 0,955-0,962; n_D^{20} 1,484-1,488; т. всп. > 100°С.

Получают из 4-изопропилциклогексанона и метилвинилкетона аннелированием по Робинсону (Bozzato G. и др., швейц. пат. 542803, 22.01.71-30.11.73, РЖХ, 1974, 16Р484П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.76. Флорион

7(6)-Ацетил-1,1-диметилоктагидронафталин, Florion (РФ). $C_{14}H_{22}O$; 206,33

Запах — цветочный (фиалки) с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 115°С/1 гПа; d_4^{20} 0,976, смесь изомеров.

Продажный продукт РФ содержит не менее 97% (оксимир.) изомерных кетонов и имеет n_D^{20} 1,501-1,502. Соотношение изомеров положения ацетильной группы 7-ацетил : 6-ацетил ≈ 7:3.

Получают диеновой конденсацией мирцена с метилвинилкетоном и последующей циклизацией под действием фосфорной кислоты (Г. В. Мелешкина, Н. И. Скворцова, Труды ВНИИСНДВ, вып. VI, 1963, с. 21).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

4.77. Амбралюкс

7-Ацетил-1,1,6,7-тетраметилоктагидронафталин, Iso E super (IFF), Iso cyclemone E (IFF), Ketofix (Dragoco). $C_{16}H_{26}O$; 234,39

С. А. 54464-57-2

Запах меняется в зависимости от изомерного состава: Iso E super и амбралюкс имеют древесно-амбровый запах; Iso cyclemone E характеризуется более выраженными древесными нотами; Ketofix имеет пудрово-древесный запах.

Острая токсичность, по данным IFF (1992); Iso E super — oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), Iso cyclemone E — oral and derm. LD_{50} > 5 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	Iso E super	90	0,960–0,968	25/25	1,497-1,502	> 100
IFF, 1992	Isocycl. E	90	0,960–0,968	25/25	1,496-1,501	> 100
Dragoco, 1989	Ketofix	–	1,004–1,014	20/4	1,511-1,521	100
КНР, 1989	–	90	0,960–0,966	20/20	1,498-1,500	>93
РФ, 1991	Амбралюкс	92	–	–	1,498–1,503	–

Получают диеновым синтезом мирцена с 3-метил-3-пентен-2-оном (катализатор $AlCl_3$) и последующей циклизацией действием фосфорной кислоты (Hall J. B., Sanders J. M., пат. США 3911018, 21.01.74-7.10.75, РЖХ, 1976, 13Р513П). Объем производства составляет десятки тонн в год.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

4.78. Амвирон

2-Ацетонил-3,3,5,5-тетраметилоктагидронафталин, Amviron (РФ). $C_{17}H_{28}O$; 248,41

Запах — древесно-амбровый, стойкий. Жидкость, т. кип. 119–122°C/2,7 гПа; d_4^{20} 0,962. Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ: oral LD_{50} > 10 г/кг (мыши).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1991), содержит не менее 85% (ГЖХ) смеси изомеров названного кетона и имеет n_D^{20} 1,496–1,498; т. всп. 141°C.

Получают конденсацией эженаля с ацетоном под действием щелочи и последующей циклизацией образующегося кетона при обработке фосфорной кислотой (Войткевич С. А., Гущина Е. И. и др., авт. свид. 1578123, 25.07.88- Б. И. № 25, 1992).

Используют в парфюмерных композициях высших сортов.

4.79. 2-Ацетил-3,3-диметилнорборнан

2-Ацетил-3,3-диметилбицикло-[2,2,1]-гептан, Camek DH (IFF). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

С. А. 42370-07-0

Запах — камфарный, травянисто-мятный, при разбавлении — нота яблок. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,963–0,971; n_D^{20} 1,475–1,479; т. всп. 77°C.

Может быть получен диеновой конденсацией циклопентадиена с мезитилоксидом и последующим селективным гидрированием.

Используют главным образом в отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.80. Филантон

1-Метил-4-изопропил-2(3)ацетил-бицикло-[2,2,2]-5-октен, Phylantone N (Dragoco) $C_{14}H_{22}O$; 206,33

С. А. 69882-09-3

Запах — древесный, цитрусовый (бергамота). Жидкость, смесь изомеров.

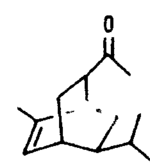
Продажный продукт Dragoco содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного кетона и имеет d_4^{20} 0,963–0,969; n_D^{20} 1,484–1,500; т. всп. > 110°C.

Может быть получен диеновой конденсацией *альфа*-терпинена и метилвинилкетона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.81. Фельвинон

2-Метил-5-изопропил-7(8)-ацетил-бицикло-[2,2,2]-2-октен, Felvinone (Naarden–Quest), Epitone (Naarden–Quest). $C_{14}H_{22}O$; 206,33



С. А. 68259-33-6

Запах — древесный, пряный, бальзамический. Жидкость, смесь изомеров, т. кип. ~ 95°C/6,7 гПа. Острая токсичность (по данным Naarden) Felvinone: oral LD_{50} 15,5 г/кг (крысы).

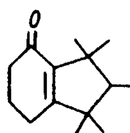
Продажный Felvinone (Quest, 1989) содержит не менее 88% (ГЖХ) изомерных кетонов и имеет d_{20}^{20} 0,952–0,958; n_D^{20} 1,482–1,485; т. всп. 103°C.

Для продукта Epitone содержание кетонов не нормируется, другие показатели (d_{20}^{20} 0,952–0,958; n_D^{20} 1,482–1,485) остаются теми же, а т. всп. 96°C.

Оба товарных продукта используются в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет. Они могут быть получены диеновой конденсацией *альфа*-фелландрена с метилвинилкетоном.

4.82. Кашмеран

1,1,2,3,3-Пентаметил-6,7-дигидро-5(H)-индан-4-он, Cashmeran (IFF). $C_{14}H_{22}O$; 206,33



С. А. 33704-51-9

Запах — цветочно-мускусный, стойкий. Кристаллизующаяся жидкость, т. кип. 93–106°C/4 гПа.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 2,9 г/кг (крысы).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров кашмерана, основной пик ~ 85%. Другие показатели: d_4^{20} 0,955–0,963; n_D^{20} 1,497–1,502; т. всп. > 100°C.

Промышленное получение базируется на использовании полупродукта синтеза галаксолида — пентаметилиндана, который подвергают селективному гидрированию (выход 26%), а затем окислению (Hall J. B., пат. США 3773836, 18.08.69–20.11.73, РЖХ, 1974, 22Р492П).

H_2 [Ni-ск.]

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.83. Бициклогексанон

4-Циклогексилциклогексанон, 4-Cyclohexyl cyclohexanone (Arc. 790), Bicyclohexanone P (IFF). $C_{12}H_{20}O$; 180,29

С. А. 90-42-6

Запах — свежий, цветочно-древесный. Жидкость

Продажный продукт IFF (1992) содержит ~ 90% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} ~ 0,976; n_D^{20} 1,487–1,493; т. всп. > 93°C.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

4.84. 2-Циклогексенилциклогексанон

2-(1-Циклогексен-1-ил)-циклогексанон, Havanol (Roure). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

Запах — богатый, теплый, нота табака. Жидкость.

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} ~ 1,00; n_D^{20} ~ 1,507; т. всп. 136°C. Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.85. Нектарил

2-(1-п-Ментен-9-ил)-циклопентанон, Nectaryl (Roure). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

Запах — тонкая нота персика. Жидкость.

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} ~ 0,964, n_D^{20} 1,495, т. всп. 164°C.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Может заменить ундекалактон, который имеет более грубый запах. Ограничений IFRA нет.

4.86. Пликатон

4-Метилтрицикло-[6,2,1,$0^{2,7}$]-ундекан-5-он, Plicatone (Firm.). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

С. А 41724-19-0

Запах — натуральный травянисто-древесный с фруктовой нотой Жидкость, т кип. 120–122°C/13,3 гПа, смесь изомеров

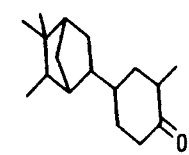
Продажный продукт Firm. (1983, 1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного кетона и имеет d_{20}^{20} 1,028–1,034; n_D^{20} 1,502–1,507; т. всп. > 100°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.87. Мустерон

2-Метил-4-(изокамф-5-ил)-циклогексанон и 2-метил-4-(изоборн-2-ил)-циклогексанон, Aldron (Dragoco), Musteron (РФ).

$C_{17}H_{28}O$; 264,41



Запах — специфический животно-мускусный, сильный. Жидкость, т. кип. 145–146,5°C/2,7 гПа, смесь изомеров с преобладанием 4-изокамфил- и 4-изоборнилзамещенных.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание кетонов, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
РФ, 1990	84 (оксим.)	~0,978	1,496–1,499	—
Dragoco	—	0,976–0,985	1,493–1,501	>101

Получают алкилированием *орто*-крезола камфеном с последующими каталитическим гидрированием и окислением образующегося замещенного циклогексанола (см. кедрол) до кетона.

Используют в микродозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.88–4.124. СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ

4.88. Циклогексилацетат

Циклогексиловый эфир уксусной кислоты, Cyclohexyl acetate (Arc. 781, RIFM), Cyclohexylacetat (Miltitz).

$C_8H_{14}O_2$; 142,20

C. A. 622-45-7

Содержится в сое и кислой капусте.

Запах — фруктовый, травянистый, резкий. Жидкость, т. кип. 174°C/1013 гПа; 61–62°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Miltitz (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) циклогексилацетата и имеет d_{20}^{20} 0,970–0,975; n_D^{20} 1,439–1,442; т. всп. 57°C.

Получают этерификацией уксусной кислоты циклогексанолом.

Используют в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.89. Циклогексилбутират

Циклогексиловый эфир масляной кислоты, Cyclohexyl butyrate (Arc. 784, RIFM), Cyclohexylbutyrat (Miltitz).

$C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C. A. 1551-44-6

Содержится в ЭМ японского апельсина.

Запах — сладкий, фруктовый. Жидкость, т. кип. 212°C/1013 гПа; 80–82°C/13 гПа; 68–72°C/2,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5,0 г/кг (мыши), derm. LD_{50} > 5,0 г/кг (морские свинки).

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (ГЖХ) циклогексилбутирата и имеет d_{20}^{20} 0,939–0,945; n_D^{20} 1,441–1,444; т. всп. 83°C.

Получают этерификацией масляной кислоты циклогексанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также при производстве пищевых ароматических эссенций. Ограничений IFRA нет.

4.90. Циклогексилизобутират

Циклогексиловый эфир изомасляной кислоты, Cyclohexyl-iso-butyrate (Arc. 785), Cyclohexylisobutyrat (Miltitz). $C_{10}H_{18}O$; 170,25

C. A. 1129-47-1

Запах — свежий, фруктово-травянистый, эфирный. Жидкость, т. кип. 76–78°C/13 гПа.

Продажный продукт Miltitz (1991) содержит не менее 98% (ГЖХ) циклогексилизобутирата и имеет d_{20}^{20} 0,929–0,935; n_D^{20} 1,437–1,440; т. всп. 76°C.

Получают этерификацией изомасляной кислоты циклогексанолом.

Используют главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

4.91. Триметилциклогексилацетат

3,3,5-Триметилциклогексилацетат, Trimethyl cyclohexyl acetate (Arc. 3003, Hüls), Sautane (Quest), Cyclonol acetate. $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

C. A. 67859-96-5

Запах – фруктово-травянистый с нотой мяты. Жидкость, смесь *цис* и *транс*-изомеров.

Продажный продукт Hüls (1990) содержит не менее 98% (ГЖХ) суммы *цис* и *транс*-изомеров названного ацетата и имеет d_4^{20} 0,919, т. всп. ~ 85°C.

В соответствии со спецификацией Quest (1989) n_D^{20} ~ 1,440; т. всп. 99°C.

Получают исчерпывающим гидрированием изофорона и последующим ацетилированием образующегося триметилциклогексанола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 7%. Ограничений IFRA нет.

4.92. Этинилциклогексилацетат

1-Этинилциклогексилацетат, Ethinyl cyclohexylacetate (Arc. 1133), Herbacet № 1 (IFF). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C. A. 5240-32-4

Запах — пряный, травянистый, древесный. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) этинилциклогексилацетата и имеет d_4^{20} 1,002–1,010; n_D^{20} 1,463–1,468; т. всп. 82°C.

Может быть получен этинилированием циклогексанона по Фаворскому и последующим ацетилированием образующегося этинилкарбинола.

Используют в отдушках различного назначения при дозировке до 10% и для получения винилциклогексилацетата. Ограничений IFRA нет.

4.93. Диметилциклогексенилкарбинилацетат

2,4-Диметил-3-циклогексенилкарбинилацетат, Floralate (IFF). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

C. A. 67634-25-7

Запах — фруктово-цитрусовый, ноты грейпфрута, дыни. Жидкость, смесь изомеров (1,2,4- и 1,3,5-замещенные).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ, 2 изомера) названного ацетата и имеет d_4^{20} 0,961–0,970; n_D^{20} 1,462–1,467; т. всп. 85°C.

Получают селективным каталитическим гидрированием диметилциклогексенилкарбальдегида и последующим ацетилированием образующегося ненасыщенного спирта.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.94. Диметилциклогексилкарбинилацетат

2,4(3,5)-Диметилциклогексилкарбинилацетат, Dihydro floralate (IFF). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

С. А. 67634-22-4

Запах — цветочный. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) смеси изомеров названного соединения и имеет d_4^{20} 0,933–0,941; n_D^{20} 1,445–1,450; т. всп. 89°С.

Может быть получен каталитическим гидрированием диметилциклогексенилкарбинилацетата или исчерпывающим гидрированием соответствующего альдегида до спирта и его ацетилированием. Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.95. Циклогексилэтилацетат

2-Циклогексилэтилацетат, Cyclohexylethyl acetate (RIFM, IFF, BASF), Lavandonat (H.+R.). $C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

С. А. 5452-75-5; 21722-83-8

Запах — фруктово-травянистый. Жидкость, т. кип. 218–221°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5,0 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
BASF, 1987	98 (ГЖХ)	0,947–0,950	1,445–1,449	94
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,945–0,953	1,444–1,450	90
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,944–0,952	1,445–1,450	79

Получают этерификацией уксусной кислоты циклогексилэтанолом. Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

4.96. Ролиат

Этил-(2,3,6-триметилциклогексил)-карбонат, Rholiate (Dragoco). $C_{12}H_{22}O_3$; 214,31

С. А. 93981-50-1

Запах — цветочный, нота розы. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Dragoco (1990) содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного карбоната и имеет d_4^{20} 0,961–0,971; n_D^{20} 1,436–1,446; т. всп. 103°С.

Получают, по всей вероятности, переэтерификацией диэтилкарбоната действием триметилциклогексанола.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

4.97. Флорамат

Этил-(2-трет.бутилциклогексил)-карбонат, Floramat (Henkel). $C_{13}H_{24}O_3$; 228,33

С. А. 67801-64-3

Запах — фруктово-древесный с цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 73°С/0,05 гПа, смесь *цис-* и *транс-* изомеров. Острая токсичность, по данным Henkel: oral LD_{50} 3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% (ГЖХ) изомерных карбонатов и имеет d_4^{20} ~0,975; n_D^{20} 1,447–1,451, т. всп. 120°С.

Получают, по всей вероятности, переэтерификацней диэтилкарбоната 2-трет. бутилциклогексанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.98. *орто*-Циклоацетат

2-Трет. бутилциклогексилацетат, *ortho*-tert. Butyl cyclohexyl acetate (Arc. 438, KAO), Agrumex HC (H.+R.), Verdox (IFF), Ortolate (Quest), 2-tert. Butylcyclohexyl acetate (Hüls).

$C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

C. A. 88-41-5

Запах — фруктово-цитрусовый с древесной нотой.

Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. ~ 35°C, смесь *цис*- и *транс*-изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель (сорт)	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Содержание *цис*-изомера, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	98	—	0,938–0,942	25/25	1,451–1,454	96
IFF, 1992	97	>80	0,938–0,946	20/4	1,450–1,455	90
Quest, 1989	—	—	~0,940	20/20	~1,452	>90
Hüls, 1990	99	>80	~0,941	30/4	—	>90
KAO, 1985	98	85–91	0,939–0,946	20/20	1,449–1,455	95
KAO, 1985 (Special)	98	93–96	0,939–0,946	20/20	1,449–1,455	95

Получают этерификацией уксусной кислоты 2-трет. бутилциклогексанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.99. Циклоацетат

4-Трет. бутилциклогексилацетат, *para*-tert. Butyl cyclohexyl acetate (Arc. 440, 441), 4-tert Butylcyclohexyl acetate (RIFM, Hüls), Vertenex (IFF), Oryclon (H.+R.), PTBCHA (Quest, KAO), Lorysia (Firm.).

$C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

C. A. 32210-23-4

Запах — цветочно-древесный. *цис*-Изомер имеет более сильный запах. Жидкость, т. кип. 246°C/1013 гПа; 105–106°C/12 гПа; P_{20} $3{,}3 \cdot 10^{-2}$ гПа, смесь *цис*- и *транс*-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель [redacted]	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Содержание *цис*-изомера, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	>27	0,933–0,941	20/4	1,450–1,455	>100
IFF, 1992	97	>47	0,933–0,941	20/4	1,449–1,454	>100
IFF, 1992	97	>67	0,933–0,941	20/4	1,449–1,454	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	—	0,934–0,937	25/25	1,450–1,453	110
Quest, 1989	97	23–29	0,933–0,937	20/20	1,451–1,454	108
Quest, 1989	98	45–50	0,933–0,937	20/20	1,451–1,454	>100
РФ, 1990	99 (омыл.)	—	~0,937	20/4	1,450–1,453	106
Hüls, 1990	99	25–30	~0,937	20/4	—	102
KAO, 1985	98	23–35	0,936–0,943	20/20	1,448–1,454	106

Продолжение табл.

Изготовитель [redacted]	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Содержание *цис*-изомера, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
KAO, 1985	98	45–55	0,936–0,943	20/20	1,448–1,454	107
KAO, 1985	98	70–80	0,936–0,943	20/20	1,448–1,456	104
Firm., 1992	—	—	0,935–0,940	20/20	1,450–1,454	99

Впервые синтезирован и предложен в качестве душистого вещества В. М. Родионовым и сотр. (Труды ВНИИСНДВ, вып. I, 1952, с. 38). Производство начато в СССР: 1950 г. — 0,4 т, 1951 г. — 0,9 т и т. д.

Преимущества парфюмерных свойств *цис*-изомера установлены позже (Somerville W. T., Theimer E. Th., швейц. пат. 416606, 23.06.58–31.01.67, РЖХ, 1968, 17Р468П).

Получают каталитическим гидрированием 4-трет. бутилфенола и последующим ацетилированием продукта гидрирования. Объем производства составляет несколько сот тонн в год.

Используется в большом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.100. 2-Третичноамилциклогексилацетат

ortho-tert. Amyl cyclohexyl acetate (Arc. 167), Amylcyclohexyl acetate (RIFM), Coniferan (IFF). $C_{13}H_{24}O_2$; 212.33

C. A. 67874-72-0

Запах — бальзамический, древесный. Жидкость, смесь *цис – транс*-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит 97% сложных эфиров (ГЖХ), в том числе не менее 60% *цис*-изомера, и имеет d_4^{20} 0,940–0,948; n_D^{20} 1,455–1,459; т. всп. > 100°С.

Может быть получен *орто*-алкилированием фенола изоамиленом и последующими гидрированием и ацетилированием.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.101. Миральдилацетат

4(5)-Ацетоксиметил-1-(4-метил-3-пентенил)-циклогексен, Myraldyl acetate (GIV). $C_{15}H_{24}O_2$; 236,36

C. A. 72403-67-9

Запах — цветочно-фруктовый с нотами зелени, цитрусов. Жидкость, т. кип. 84–85°С/0,013 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 98% (омыл.) сложных эфиров и имеет d_4^{20} 0,947–0,957; n_D^{20} 1,475–1,485; т. всп. > 100°С. Продукт, вырабатываемый в КНР (1990), содержит 95% сложного эфира, имеет d_{25}^{25} 0,943–0,947; n_D^{20} 1,472–1,485.

Может быть получен селективным восстановлением циклоналя (Myraldene — GIV) и ацетилированием полученного ненасыщенного спирта смесью уксусного ангидрида и фосфорной кислоты (Ochsner P. A., швейц. пат. 573389, 15.03.73–15.03.76, РЖХ, 1976 , 21Р506П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.102. Дигидроамбрат

1-Винил-2-втор. бутилциклогексилацетат, Dihydro ambrate (GIV) $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34

C. A. 37172-02-4

Запах — древесно-амбровый. Жидкость, т. кип. 85–86°С/1,5 гПа.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 95% (ГЖХ) *цис*- и *транс*-изомеров названного ацетата и имеет d_4^{20} 0,950–0,956; n_D^{20} 1,465–1,470; т. всп. > 100°С. Может быть получен этинилировани ем 2-втор бутилциклогексанона и последующими селективным гидри-

рованием и ацетилированием (Nikawitz E. J. и др., пат. США 3769330, 10 11 70–30 10 73, РЖХ, 1974, 18Р400П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5% Ограничений IFRA нет.

4.103. Ветинилацетат

4-Метил-2-(1,1,2-триметилпропил)-циклогексилацетат, Vetinyl acetate (РФ). $C_{15}H_{28}O_2$; 240,39

Запах — древесно-ирисовый. Жидкость, т. кип. 130–133°С/13 гПа; 110–111°С/3,6 гПа; d_4^{20} 0,939; P_{20} $8{,}2 \cdot 10^{-3}$ гПа, смесь пространственных изомеров.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 94% (омыл.) названного сложного эфира и имеет n_D^{20} 1,463–1,465; т. всп. 116°С.

Получают из соответствующего спирта (ветинола) ацетилированием уксусным ангидридом (А. С. Подберезина и др., Масло-жировая пром-сть, 1974, № 9, с. 32).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

4.104. Ветинилпропионат

4-Метил-2-(1,1,2-триметилпропил)-циклогексилпропионат, Vetinyl propionate (РФ). $C_{16}H_{30}O_2$; 254,42

Запах — приятный, древесно-смолистый. Жидкость, т. кип. 108–112°С/2,7 гПа; d_4^{20} 0,932; P_{20} $2{,}3 \cdot 10^{-3}$ гПа, смесь пространственных изомеров.

В соответствии со спецификацией РФ (1990), товарный продукт содержит не менее 94% (омыл) названного сложного эфира и имеет n_D^{20} 1,463–1,464

Получают из соответствующего спирта взаимодействием с пропионовым ангидридом (Л. А. Хейфиц и др., Масло-жировая пром-сть, 1977, № 12, с. 24).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках

4.105. Циклооктилметилкарбонат

Метилциклооктилкарбонат, Jasmacyclat (Henkel). $C_{10}H_{18}O_3$; 186,25

C. A. 61699-38-5

Запах — цветочно-травянистый, нота жасмина. Жидкость, т. кип 47°С/0,01 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel, — oral LD_{50} 2,4 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel содержит ~95% (ГЖХ) названного карбоната и имеет d_4^{20} 1,038; n_D^{20} 1,456–1,460; т. всп. 119°С.

Получают взаимодействием циклооктанола с метиловым эфиром хлоромуравьиной кислоты (Bruns K., Meins P., заявка ФРГ 2518392, 25.04.75–4.11.76, РЖХ, 1977, 18Р421П). Возможно получение переэтерификацией диметилкарбоната циклооктанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.106. Аллилциклогексилпропионат

Аллиловый эфир 3-циклогексилпропионовой кислоты, Allyl cyclohexyl propionate (Arc. 77, RIFM, BBA, IFF), Cyclohexylpropionic acid allyl ester (H.+R.). $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

C. A. 2705-87-5

Запах — сильный, сладкий, фруктовый (ананаса). Жидкость, т. кип. 91 °С/1,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral. LD_{50} 0,59 г/кг (крысы)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	97	0,946–0,951	25/25	1,458–1,464	>100
BBA, 1990	98	0,946–0,949	20/20	1,461–1,463	>100
IFF, 1992	97	0,946–0,954	20/4	1,458–1,463	>100

Получают этерификацией циклогексилпропионовой кислоты аллиловым спиртом. В соответствии с рекомендацией IFRA продукт, используемый в парфюмерии и отдушках, не должен содержать более 0,1% аллилового спирта.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях.

4.107. Аллилциклогексоксиацетат

Аллиловый эфир циклогексоксиуксусной кислоты, Isoananate (H.+R.), Cyclogalbanate (Dragoco). $C_{11}H_{18}O_3$; 198,26

С. А. 68901-15-5

Запах — очень сильный, зелени (гальбанума), с фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 85 °С/4 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98	1,012–1,016	25/25	1,460–1,464	136
Dragoco, 1990	95	1,016–1,024	20/20	1,461–1,467	98

Получают этерификацией циклогексоксиуксусной кислоты аллиловым спиртом.

В соответствии с рекомендацией IFRA содержание аллилового спирта в товарном продукте не должно превышать 0,1%.

Используют главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке порядка 0,1%.

4.108. Метилциклопентилиденацетат

Метиловый эфир циклопентилиденуксусной кислоты, Cyclopidene (Firm.). $C_8H_{12}O_2$; 140,19

С. А. 40203-73-4

Запах — очень сильный, цветочный (туберозы, иланг-иланга). Жидкость, т. кип. 57–60 °С/10,6 гПа.

В соответствии со спецификацией Firm. (1983) товарный продукт должен содержать не менее 80% (ГЖХ) названного сложного эфира и иметь d_{20}^{20} 1,006–1,014; n_D^{20} 1,473–1,477; т. всп. 69 °С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.109. Изопропилциклогексенилацетат

Изопропиловый эфир 1-циклогексен-1-илуксусной кислоты, Cypronat (Henkel). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

Запах — сильный, сладкий, медовый, стойкий. Жидкость, т. кип. 93–97 °С/24 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel: oral LD_{50} 3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel содержит ~95% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{25}^{25} ~ 0,962; n_D^{20} 1,459–1,463; т. всп. 87 °С

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.110. Ветиверат

2-Метил-2-циклогексилпент-4-илацетат, Vetiverat (Dragoco) $C_{14}H_{26}O_2$; 226,36

С. А. 93917-67-0

Запах — фруктовый, при разбавлении — ноты ландыша, грейпфрута. Жидкость.

Продажный продукт Dragoco (1990) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,933–0,938; n_D^{20} 1,456–1,461; т. всп. 116 °С.

Может быть получен ацетилированием 2-метил-2-циклогексилпентан-4-ола — полупродукта синтеза ветиверкетона.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, особенно для шампуней и пеномоющих средств. Ограничений IFRA нет.

4.111. Декалилформиат

Декагидро-*бета*-нафтилформиат, формиат 2-декалола, Decahydro-*beta*-naphtyl-formate (Arc. 827, RIFM, H.+R.). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

С. А. 10519-12-7

Запах — древесно-травянистый с нюансом запаха сандалового дерева. Жидкость, смесь пространственных изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_5 >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 93% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 1,021–1,031; n_D^{20} 1,480–1,486, т. всп. 106°С.

Получают этерификацией муравьиной кислоты декалолом.

Используют в сравнительно небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек. Ограничений IFRA нет.

4.112. Декалилацетат

Декагидро-*бета*-нафтилацетат, ацетат 2-декалола, Decahydro-*beta*-naphtyl acetate (Arc. 826, RIFM, H.+R., IFF) $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 10519-11-6

Запах — цветочно-фруктовый с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 120 °С/6,5 гПа, смесь пространственных изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98 (омыл.)	1,005–1,015	25/25	1,475–1,482	125
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,005–1,013	20/4	1,474–1,479	>100
РФ, 1990	99 (омыл.)	~1,011	20/4	1,477–1,480	109

Получают этерификацией уксусной кислоты декалолом. Объем производства составляет несколько десятков тонн в год.

Используют в парфюмерных композициях и главным образом в отдушках для мыла и моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.113. Декалилизобутират

Декагидро-*бета*-нафтилизобутират, изобутират 2-декалола, (Trans) decahydro-*beta*-naphtyl isobutyrate (IFF) $C_{14}H_{24}O_2$; 224,34

С. А. 67874-78-6

Запах — мягкий, фруктовый, стойкий. Жидкость, смесь пространственных изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомерных изобутиратов и имеет d_4^{20} 0,972–0,980; n_D^{20} 1,468–1,472; т. всп. >100 °C.

Может быть получен этерификацией изомасляной кислоты декалолом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.114. Оксиокталинформиат

2,5,9,10-Тетраметил-5,6-дегидродекалилформиат, Oxyoctaline formate (GIV) — $C_{15}H_{24}O_2$; 236,36

С. А. 65405-72-3

Запах — древесно-амбровый, сильный. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомерных формиатов (основной изомер ≥90%) и имеет d_4^{20} 1,030–1,035; d_{25}^{25} 1,029–1,034; n_D^{20} 1,502–1,505; т. всп. >100 °C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.115. Гликомель

Метиловый эфир 3-метил-3-(5-норборнен-2-ил)-глицидной кислоты, Glycomel (Firm.) — $C_{12}H_{16}O_3$; 208,26

С. А. 72175-33-8

Запах — фруктово-цветочный, сладкий, ноты жасмина, магнолии, дыни, клубники. Жидкость, т. кип. 82 °С/0,7 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Firm. (1983) содержит не менее 97% (ГЖХ) смеси изомерных сложных эфиров и имеет d_{20}^{20} 1,110–1,117; n_D^{20} 1,489–1,493; т. всп. >100 °C.

Может быть получен взаимодействием циклопентадиена с метилвинилкетоном и последующей реакцией образующегося бициклического кетона с метиловым эфиром хлоруксусной кислоты по Дарзану

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.116. Махагонат

1-Метил-4-изопропил-5(6)-карбометокси-бицикло-[2,2,2]-2-октен, Mahagonate (Dragoco), Arboroma (Quest). — $C_{14}H_{22}O_2$; 222,33

С. А. 68928-82-5; 68966-86-9

Запах — древесный, ноты пачули, ветиверии. Жидкость, смесь изомеров.

Коммерческие продукты

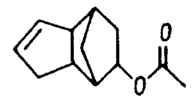
Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
Dragoco, 1990	90 (ГЖХ, 4 изомера)	0,997–1,002	1,478–1,485	>110
Quest, 1989	—	~0,999	~1,482	>100

Получают диеновым синтезом из *альфа*-терпинена и метилакрилата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

4.117. Трициклодеценилацетат

8(9)-Ацетокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3-децен, Dihydro-dicyclopentadienyl acetate (Arc. 966), Verdyl acetate (GIV), Cyclacet (IFF), Herbaflorat (H.+R.), Greenylacetat (Dragoco), Jasmacyclene (Quest), Tricyclo decenyl acetate (KAO). — $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26



С. А. 2500-83-6; 5413-60-5

Запах — сильный травянистый, свежей древесины, фруктов. Жидкость, т кип. 119–121 °C/10 гПа, смесь изомеров. Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (ГЖХ)	1,071–1,077	20/20	1,494–1,498	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,069–1,077	25/25	1,493–1,497	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	1,070–1,075	25/25	1,494–1,498	>100
Quest, 1989	97 (ГЖХ)	~1,074	20/20	~1,496	118
KAO, 1985	98 (ГЖХ)	1,075–1,081	20/20	1,492–1,498	124

Получают присоединением уксусной кислоты к дициклопентадиену (Хейфиц Л. А., Вирезуб С. И , Журн. общ. хим. 1964, 34, № 6, с. 2081).

Используют в большом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.118. Трициклодецилацетат

8-Ацетокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-декан, Dihydro cyclacet (IFF).

$C_{12}H_{18}O_2$, 194,27

C. A. 64001-15-6

Запах — сильный, травянистый, нота базиликового масла. Жидкость, т. кип. 81–82 °C/2,7 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} >2 г/кг (крысы).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров названного ацетата и имеет d_4^{20} 1,047–1,055, n_D^{20} 1,482–1,487; т. всп. >100 °C.

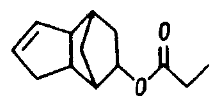
Получают каталитическим гидрированием трициклодеценилацетата (Хейфиц Л А , Вирезуб С И , Журн общ хим , 1964, 34, 6, с 2081)

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.119. Трициклодеценилпропионат

Трицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)-децен-8-илпропионат, Tricyclodecenyl propionate (RIFM, KAO), Verdyl propionate (GIV), Cyclaprop (IFF), Florocyclene (Quest), Greenylpropionat (Dragoco)

$C_{13}H_{18}O_2$; 206,28



C. A. 17511-60-3

Запах — травянистый с цветочно-фруктовой и древесной нотами Жидкость, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	97	1,049–1,054	20/4	1,489–1,493	>100
IFF, 1992	97	1,048–1,056	20/4	1,489–1,493	>100
Quest, 1989	97	~1,053	20/20	~1,491	>100
Dragoco, 1990	95	1,050–1,055	20/4	1,490–1,494	>100
KAO, 1985	98	1,052–1,060	20/20	1,488–1,494	121

Получают присоединением пропионовой кислоты к дициклопентадиену.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет

4.120. Трициклодеценилбутират

Трицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)децен-8-илбутират, Gardocyclene (Quest). $C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

C.A. 68039-39-4

Запах — сильный, цветочный. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров названного бутирата и имеет $d_{20}^{20} \sim 1,027$; $n_D^{20} \sim 1,485$; т. всп. >100°C.

Получают присоединением масляной кислоты к дициклопентадиену.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

4.121. Трициклодеценилизобутират

Трицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)-децен-8-илизобутират, Cyclabute (IFF), Tricyclo decenyl iso-butyrate (KAO). $C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

C.A. 67634-20-2

Запах — травянистый, фруктовый. Жидкость, смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	1,022–1,030	20/4	1,482–1,487	>100
KAO, 1985	98	1,027–1,035	20/20	1,481–1,487	111

Получают присоединением изомасляной кислоты к дициклопентадиену.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

4.122. Трициклодеценилпивалат

Трицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)-децен-8-илпивалат, Pivaloxycyclene (Quest). $C_{15}H_{22}O_2$; 234,35

C.A. 68039-44-1; 68039-45-2

Запах — пудрово-цветочный, с нотой персика. Кристаллическая масса, т. пл. 42°C, смесь изомеров.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 92% (ГЖХ) названного эфира пивалиновой кислоты и имеет d_{20}^{20} 1,002–1,006 (переохл.); n_D^{20} 1,480–1,484 (переохл.); т. всп. > 100°C.

Может быть получен присоединением пивалиновой кислоты к дициклопентадиену.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

4.123. Базилекс

8-Ацетокси-3-метил-9-метилентрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3-децен, Basilex (Firm.). $C_{14}H_{18}O_2$; 218,31

C.A. 81836-13-7; 81836-17-1

Запах — травянистый, подобный запаху базиликового ЭМ, стойкий. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт Firm. (1985) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного ацетата и имеет d_{20}^{20} 1,053–1,063; n_D^{20} 1,502–1,508; т. всп. 100°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

4.124. Этилтрициклодецилкарбоксилат

Этилтрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-дец-2-ил-карбоксилат, 2-карбэтокситрицикло [5, 2, 1, $0^{2,6}$]-декан, Fruitate (KAO). $C_{13}H_{20}O_2$; 208,30

Запах — фруктово-цитрусовый, древесный. Жидкость.

Продажный продукт KAO (1990) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_{20}^{20} 1,054–1,064; n_D^{20} 1,482–1,488; т. всп. 130°С.

Может быть получен карбонилированием трициклодецена в присутствии этилового спирта и фтористо-водородной кислоты (Ishihara M., Morokuma T., пат. США 4973740, 28.09.89–27.11.90, РЖХ, 1991, 22Н74П).

Соответствующая трициклодеканкарбоновая кислота может быть также получена перегруппировкой 8-формокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-декана (Fujikara J. и др., пат. США 4602107, 18.07.83–22.07.86, РЖХ, 1987, 6Р578П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках.

4.125–4.133. N-СОДЕРЖАЩИЕ СОЕДИНЕНИЯ, ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ

4.125. Тонкаверт

2,4(3,5)-Диметил-3-циклогексен-1-карбонитрил, Tonkavert (Dragoco). $C_9H_{13}N$; 135,21

C.A. 66848-40-6

Запах — резкий, бобов тонка. Жидкость, смесь структурных и пространственных изомеров.

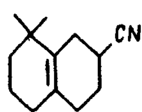
Продажный продукт Dragoco (1990) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров названного нитрила и имеет d_4^{20} 0,912–0,922; n_D^{20} 1,467–1,477; т. всп. 88°С.

Может быть получен превращением смеси 2,4(3,5)-диметил-3-циклогексен-1-карбальдегидов в соответствующие оксимы и их дегидратацией с уксусным ангидридом

Используется главным образом в отдушках для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

4.126. Диметилокталинкарбонитрил

8,8-Диметил-1,2,3,4,5,6,7,8-октагидронафт-2(3)илкарбонитрил, Palmanitrile (Dragoco). $C_{13}H_{22}N$; 189,30



C.A. 72928-51-9

Запах — свежий (озона), цветочный. Жидкость, склонная к кристаллизации, смесь изомеров, т. кип. 125°С/1,3 гПа.

В соответствии со спецификацией Dragoco продажный продукт содержит не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного нитрила и имеет d_4^{20} 0,970–0,980; n_D^{20} 1,498–1,508; т. всп. 125°С.

Может быть получен диеновой конденсацией мирцена с акрилонитрилом и последующей циклизацией под действием фосфорной кислоты (Klein E., заявка ФРГ 2210762, 6.03.72–20.09.73, РЖХ, 1974, 21Р597П).

Используют в парфюмерных композициях и, особенно, в отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

4.127. Диметилбициклогептилкарбонитрил

3,6(5)-Диметилнорборн-2-илкарбонитрил, Romaryl (Dragoco). $C_{10}H_{15}N$; 149,24

Запах — свежий, травянистый с оттенком запаха розмаринового ЭМ. Жидкость, смесь изомеров

Продажный продукт Dragoco (1988) имеет d_4^{20} 0,939–0,949; n_D^{20} 1,465–1,475; т. всп. 85°С.

Может быть получен диеновой конденсацией метилциклопентадиена с нитрилом кротоновой кислоты и последующим каталитическим гидрированием.

Используется в парфюмерных композициях и особенно в отдушках для мыла при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.128. Оксим диметилбициклооктанона

1,5-Диметил-8-гидроксиминобицикло-[3, 2, 1]-октан, Buccoxime (Dragoco). $C_{10}H_{17}ON$; 167,26

Запах — свежий, фруктовый, нота черной смородины. Кристаллическая масса.

Продажный продукт Dragoco (1990) представляет собой кристаллы, т. пл. 129–131°С, чистота 98% (ГЖХ), т. всп. > 100°С.

Получают оксимированием соответствующего кетона гидроксиламином в присутствии ацетата натрия или щелочи (Brunke E.-J., заявка ФРГ 3129934, 29.07.81–10.02.83, РЖХ, 1984, 8Р546П).

Используют в парфюмерных композициях при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

4.129. Метокситрициклодецен

8-Метокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)-децен, Verdalia A (Quest). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

C.A. 27135-90-6;
53018-24-9

Запах — сильный, цветочный, свежей зелени, ноты гиацинта, аниса. Жидкость, т. кип. 222°С/1013 гПа; 53–55°С/4 гПа, смесь изомеров.

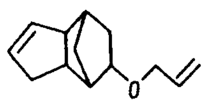
Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 96% (ГЖХ) суммы изомеров метокситрициклодецена и имеет $d_{20}^{20} \sim 1,010$; $n_D^{20} \sim 1,498$; т. всп. 88°С.

Получают взаимодействием дициклопентадиена с метанолом в присутствии кислотного катализатора (Хейфиц Л. А., Вирезуб С. И., Журн. общ. хим., 1964, 34, 6, с. 2081).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Эффективен даже в малых концентрациях (до 1%). Ограничений IFRA нет.

4.130. Аллилокситрициклодецен

8-Аллилокситрицикло-[5,2,1,$0^{2,6}$]-3(4)-децен, Fleuroxene (Naarden). $C_{13}H_{18}O$; 190,28



Запах — цветочный с фруктовой и древесной нотами. Жидкость, т. кип. ~150°С/20 гПа, смесь изомеров. Острая токсичность, по данным Naarden: oral LD_{50} 4,17 мл/кг (крысы).

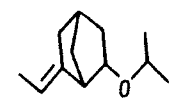
В соответствии со спецификацией Naarden (1985) продажный продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров аллилокситрициклодецена и имеет d_{20}^{20} 0,994 – 1,002; n_D^{20} 1,498–1,504; т. всп. 78°С.

Может быть получен взаимодействием дициклопентадиена с аллиловым спиртом в присутствии кислотного катализатора.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. В соответствии с рекомендацией IFRA содержание свободного аллилового спирта не должно превышать 0,1%.

4.131. Изопроксен

2-Этилиден-6-изопропоксибицикло-[2,2,1]-гептан, Isoproxen (IFF). $C_{12}H_{20}O$; 180,29



C.A. 90530-04-4

Запах — травянисто-цитрусовый с нотами петигреневого и куминового ЭМ. Жидкость, смесь бициклического и трициклического изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 99% (ГЖХ) суммы изомерных би- и трициклических эфиров и имеет d_4^{20} 0,903 0,911; n_D^{20} 1,462–1,468; т. всп. 74°С.

Может быть получен взаимодействием этилиденнорборнена с изопропиловым спиртом в условиях кислотного катализа.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

4.132. Рубофикс

4(5)-Метил-9-(эпоксиэтил)-трицикло-[6,2,1,$0^{2,1}$]-4-ундецен, Rhubofix (Firm.). $C_{14}H_{20}O$; 204,31

C.A. 41723-98-2;
41816-03-9

Запах – древесный, приятный с цветочно-фруктовыми нотами, стойкий. Жидкость, т. кип. 75–80°C/0,013 гПа; смесь изомеров.

Продажный продукт Firm. (1983) содержит не менее 70% (ГЖХ) двух основных изомеров названного вещества и имеет d_{20}^{20} 1,020–1,040; n_D^{20} 1,502–1,510; т. всп. >100°C. Спецификация Firm. (1992) предусматривает d_{20}^{20} 1,023–1,033; n_D^{20} 1,502–1,508.

Может быть получен из этилиденнорборнена путем эпоксидирования и диеновой конденсации с изопреном.

Используют в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

4.133. Рубофлор

6(7)-Этилиден-5,8-метанооктагидро-2H-1-бензопиран, 9(10)-этилиден-3-оксатрицикло-[6,2,1,$0^{2,7}$]-ундекан, Rhuboflor (Firm.). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

C.A. 85633-07-4;
85633-08-5;
85700-01-2;
85700-02-3

Запах — сильный фруктово-цветочный, травянистый с нотами сена, ириса. Жидкость, т. кип 106–108°C/16 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Firm. (1984) содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного соединения и имеет d_{20}^{20} 1,002–1,010; n_D^{20} 1,503–1,508; т. всп. >100°C. Острая токсичность, по данным Firm.: oral LD_{50} 5,0 г/кг (крысы).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках обычно при дозировке до 0,5%, а в некоторых случаях 3–5%. Ограничений IFRA нет.

5. МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ

5.1–5.17. Производные циклододекана
5.18–5.22. Макроциклические кетоны
5.23–5.32. Макроциклические лактоны и оксалактоны

5.1–5.17. ПРОИЗВОДНЫЕ ЦИКЛОДОДЕКАНА

5.1. Метилциклододециловый эфир

Метоксициклододекан, Methyl cyclododecyl ether (Hüls), Palisandin (H+R). $C_{13}H_{26}O$, 198,35

OCH_3

C.A. 2986-54-1

Запах — древесный, ноты кедра, пачули. Жидкость, т. заст. 9°C; т. кип. 86–92°C/4 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т.всп., °C
H+R., 1988	98	0,910–0,915	25/25	1,472–1,475	>100
Hüls, 1990	98	~0,911	20/4	—	115

Получают метилированием циклододеканола диметилсульфатом (Leidig T., пат. ФРГ 1196810, 8.10.63–31.03.66, РЖХ, 1967, 6Р365П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

5.2. Диметилкеталь циклододеканона

1,1-Диметоксициклододекан, Palisandal (H.+R.). $C_{14}H_{28}O_2$; 228,37

OCH_3
OCH_3

C. A. 950-33-4

Запах — древесный, ноты кедра, пачули с нюансом амбры. Жидкость, т. кип. 103–108°C/4 гПа.

В соответствии со спецификацией H.+R. (1988) продажный продукт содержит не менее 95% кеталя и имеет d_{25}^{25} 0,948–0,963; n_D^{20} 1,475–1,485; т. всп.> 100°C.

Получают кетализацией циклододеканона. (Leidig T., пат. ФРГ, 1184032, 15.03.63–16.02.67, РЖХ, 1968, 6Р496П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.3. Метилметоксициклододекан

1-Метил-1-метоксициклододекан, Madrox (GIV). $C_{14}H_{28}O$; 212,37

OCH_3

C. A. 37514-30-0

Запах — древесный, ноты мускуса, амбры. Жидкость .

В соответствии со спецификацией GIV (1984) продажный продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_4^{20} 0,919–0,924; d_{25}^{25} 0,918–0,923; n_D^{20} 1,478–1,482; т. всп. >100°C.

Может быть получен из циклододеканона последовательными: взаимодействием по Гриньяру с метил-магнийхлоридом и метилированием полученного спирта диметилсульфатом. (Naegeli P., швейцарск. пат. 533072, 3.11.70–15.03.73, РЖХ, 1973, 20Р424П; швейцарск. пат. 550851, 3.11.70–28.06.74, РЖХ, 1975, 5Р514П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

5.4. Метилциклододецилформаль

Метоксиметилциклододециловый эфир, $C_{14}H_{28}O_2$; 228,37
Boisambrene (Henkel)

Запах — сильный, древесный, с кедрово-амбровой нотой. Жидкость, т. кип. 86°C/0,01 гПа; P_{20} $1{,}2\cdot10^{-2}$ гПа.

Продажный продукт Henkel содержит около 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_4^{20}~0,946; n_D^{20} 1,468–1,472; т. всп. 142°C.

Может быть получен взаимодействием хлорметилового эфира циклододеканола с метилатом натрия (Bruns K., Meins P., заявка ФРГ 2427500, 7.06.74–18.12.75, РЖХ, 1976, 19Р496П) или с едким кали и метанолом в условиях фазового переноса.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках Ограничений IFRA нет.

5.5. Этилциклододецилформаль

Этоксиметилциклододециловый эфир, $C_{15}H_{30}O_2$; 242.41
Boisambrene forte (Henkel)

С. А. 58567-11-6

Запах — сильный, древесный, с кедрово-амбровой нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 133–135°C/5,3 гПа; 124–125°C/1,5 гПа; P_{20} $1{,}8\ 10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel, — oral LD_{50} 5,0 г/кг (мыши).

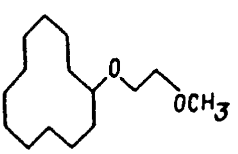
Продажный продукт Henkel содержит около 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_4^{20} ~ 0,934; n_D^{20} 1,463–1,467; т. всп. 145°C.

Может быть получен переацетализацией диэтилформаля циклододеканолом (Schaper U.-A , заявка ФРГ 3030590, 13.08 80–18 03 82, РЖХ, 1982, 23Н48П) или взаимодействием хлорметилового эфира циклододеканола с едким кали и спиртом при катализе фазового переноса (Андреев В. М и др., Хим.-фарм. журнал, 1990, 24, № 6, с 50).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.6. 2-Метоксиэтилциклододециловый эфир

1-Метокси-2-циклододецилоксиэтан, $C_{15}H_{30}O_2$; 242,41
2-Methoxyethyl cyclododecyl ether (Hüls), Ambrolignane (Naarden)



С. А. 77923-28-5

Запах — древесный, с амбровой нотой. Жидкость, т. кип. 170°C/6,7 гПа; P_{20} $1{,}5\cdot10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т.всп , °C
Naarden, 1985	95	0,936–0,944	20/20	1,467–1,473	131
Hüls, 1990	–	~0,938	20/4	–	139

Может быть получен из циклододеканона взаимодействием с *орто*-муравьиным эфиром и монометиловым эфиром этиленгликоля при последующем гидрировании образующегося циклододеценилового эфира

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.7. Ацетилциклододецен

Метилциклододеценилкетон, Acetylcyclododecen (BASF). $C_{14}H_{24}O$; 208,34

Запах — древесно-мускусный. Жидкость, т. кип. 143–145°С/2,7 гПа; P_{20} 2 0.10^{-3} гПа.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ. oral LD_{50}>20 г/кг.

Продукт, вырабатываемый в РФ (1989), содержит не менее 98,5% ненасыщенного кетона и имеет n_D^{20} 1,501–1,503. Получают этинилированием циклододеканона и последующей перегруппировкой этинилкарбинола в ненасыщенный кетон под действием кислоты (Hoffmann W. и др., заявка ФРГ 2630835, 9.07.76–19.01.78, РЖХ, 1978, 22Р607П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

Подобный насыщенный кетон — ацетилциклододекан — может быть получен радикальным присоединением ацетальдегида к циклододецену (Подберезина А. С. и др., Масло-жировая пром-сть, 1987, № 9, с. 27).

5.8. Циклододецилизобутират

Cyclododecyl isobutirate. $C_{16}H_{30}O_2$; 254,42

Запах — древесно-мускусный, с фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 135–136°С/2,7 гПа; P_{20} 1,6·10^{-3} гПа.

Продукт, вырабатываемый в РФ (1991), содержит не менее 98% (ГЖХ) циклододецилизобутирата и имеет d_4^{20} 0,934–0,941; n_D^{20} 1,465–1,467.

Получают этерификацией изомасляной кислоты циклододеканолом (Подберезина А. С. и др., Пищевая пром-сть, 1992, № 5, 22).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.9. Эпоксициклододекан

13-Оксабицикло-[10,1,0]-тридекан, Cyclododecene oxide (Hüls). $C_{12}H_{22}O$; 182,31

С. А. 286-99-7

Запах — сильный, камфарно-мускусный, нота, родственная запаху пачули. Жидкость, смесь *цис-транс*-изомеров.

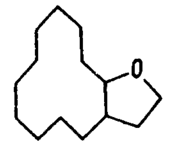
Продажный продукт Huls (1990) содержит не менее 99% (ГЖХ) суммы изомеров эпоксициклододекана и имеет d_4^{20}~0,955; т. всп 113°С

Может быть получен эпоксидированием циклододецена.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в качестве полупродукта синтеза душистых веществ. Ограничений IFRA нет.

5.10. Цикламбер

13-Оксабицикло-[10,3,0]-пентадекан, Cyclamber (Henkel). $C_{14}H_{26}O$; 210,36



С.А. 42824-62-4

Запах — древесный, с амбровой нотой. Жидкость, т. кип. 92–94 °С/0,2 гПа.

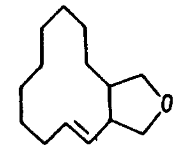
Продажный продукт Henkel содержит ~95% (ГЖХ) смеси стереоизомеров названного вещества и имеет d_{25}^{25} ~0,961; n_D^{20}1,491–1,495; т. всп. 151 °С.

Получают многостадийным синтезом из циклододеканона. Завершающая стадия — дегидратация 2-(2-гидроксиэтил)-циклододеканола (Meins P., Bruns K., заявка ФРГ 2810107, 9.03.78–13.09.79, РЖХ, 1980, 18Р558П; Захаркин Л. И. и др., Журн. орг. хим., 1990, 26, № 9, с. 1962).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.11. Цикломускен

14-Оксабицикло-[10,3,0]-2-пентадецен, Muscogene (Dragoco), Cyclomuscene (РФ). $C_{14}H_{24}O$; 208,34



С.А. 40786-62-4

Запах — мускусно-древесный. Жидкость, т. кип. 114–116 °С/1,3 гПа, смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Dragoco, 1989	85	0,967–0,974	1,497–1,503	140
РФ, 1990	85	-	1,499–1,503	-

Получают взаимодействием циклододецена с формальдегидом по реакции Принса в среде уксусной кислоты в присутствии серной кислоты или бензолсульфокислоты (Klein E., Roth A., пат. ФРГ 2209372, 28.02.72–27.09.73, РЖХ, 1974, 18Р401П; Карцева Г. М. и др., Масло-жировая пром-сть, 1979, № 2, с. 29).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

5.12. Лигноксан

14-Метил-13-оксабицикло-[10,3,0]-пентадекан, Lignoxan (Wacker). $C_{15}H_{28}O$; 224,39

Запах — древесный, с амбровой нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 92–97 °С /0,01 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~95% (ГЖХ) названного вещества и имеет d_4^{20} ~0,942; n_D^{20}1,480–1,490; т. всп. 97 °С. Получают взаимодействием циклододеканона с хлористым аллилом в условиях катализа фазового переноса, селективным восстановлением образующегося аллилциклододеканона и циклизацией аллилциклододеканола (Gebauer H., заявка ФРГ 3137939, 24.09.81–19.05.83, РЖХ, 1984, 16Р414П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

5.13. Триметилэпоксициклододекадиен

1,5,9-Триметил-1,2-эпокси-5,9-циклододекадиен и изомеры, Cedroxyde (Firm.). $C_{15}H_{24}O$; 224,36

C.A. 71735-79-0

Запах — сильный древесно-амбровый с нотами пачули, сантала. Жидкость, т. кип. 125 °С/6,7 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным Firm. (1979): oral LD_{50}18,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Продажный продукт Firm. (1979) содержит не менее 80% (ГЖХ) триметилэпоксициклододекадиена и имеет d_{20}^{20}0,962–0,980; n_D^{20}1,504–1,509; т. всп. > 100°С.

Может быть получен эпоксидированием триметилциклододекатриена надуксусной кислотой (Ohloff G., Schulte-Elte K. H., швейц. пат. 474567, 11.05.65–15.08.69, РЖХ, 1970, 14Р512П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

5.14. Буазанол

Смесь 2,6,9-триметил-2,5,9-циклододекатриенола и 2-метилен-6,9-диметил-5,9-циклододекадиенола, Boisanol (H.+R.). $C_{15}H_{24}O$; 220,36

Запах — древесный (кедра) с нотами амбры и ветивера, стойкий. Вязкая жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт H.+R. (1988) имеет d_{25}^{25} ~ 0,987; n_D^{20} ~1,526.

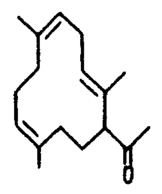
Может быть получен эпоксидированием триметилциклододекатриена с последующим восстановлением изопропилатом алюминия.

(Nienhaus J. и др., заявка ФРГ 3711157, 2.04.87–2 10.88, РЖХ, 1989, 13Р2030П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

5.15. Ацетилтриметилциклододекатриен

1-Ацетил-2,6,10-триметил-2,5,9-циклододекатриен, Trimofix O (IFF). $C_{17}H_{26}O$; 246,40



С.А. 68610-78-6

Запах — сильный, древесно-амбровый, с нотами ветивера, табака. Жидкость.

Острая токсичность (IFF, 1992): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 80% (ГЖХ) смеси изомеров ацетилтриметилциклододекатриена и имеет d_4^{20}0,980–0,990; n_D^{20}1,514–1,520; т. всп. >100°С.

Получают взаимодействием эквимолекулярных количеств изопрена и пиперилена при катализе хромилхлоридом и последующим ацетилированием образовавшегося триметилциклододекатриена (Hall J. B., пат. США 3816349, 23.05.72–11.06.74, РЖХ, 1975, 6Р492П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

5.16. Циклододеценилацетонитрил

1-Цианометилциклододецен, Cyclododecenyl acetonitrile (Hüls) $C_{14}H_{23}N$; 205,34

С.А 64723-66-6;
99228-24-7, 99228-25-8

Запах — приятный, цветочный (розы, ландыша), с мускусной нотой. Жидкость, т. заст. ~10 °С.

Продажный продукт Hüls (1990) содержит смесь *цис-транс*-изомеров циклододеценилацетонитрила с примесью циклододецилиденацетонитрила суммарно ~95% (ГЖХ) и имеет d_4^{20}0,950; т. всп. 168 °С.

Может быть получен взаимодействием циклододеканона с циануксусной кислотой по Кневенагелю (Kanfhold M., заявка ФРГ 3400690, 11.01.84–18.07.85, РЖХ, 1986, 6Н154П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.17. Декаметиленоксазол

13-Аза-15-оксабицикло-[10,3,0]-пентадека-1,13-диен, Sclarene (Roure). $C_{13}H_{21}ON$; 207,32

Запах — сильный, мускатного шалфея, с древесной нотой. Жидкость.

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} ~1,020; n_D^{20} ~1,503; т. всп. 130 °С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках (Plattier M и др., швейц. пат. 577318, 28.09.73–15.07.76, РЖХ, 1977, 4Р603П). Ограничений IFRA нет.

5.18–5.22. МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ КЕТОНЫ

5.18. Циклопентадеканон

Cyclopentadecanone (Arc. 813, RIFM), Exaltone (Firm.), Musk CPD (GIV). $C_{15}H_{28}O$; 224,39



С.А. 502-72-7

Запах — сильный, натурального мускуса. Кристаллическое вещество, т. пл. 65–67 °С; т. кип. 120 °С/0,7 гПа; 85 °С/0,07 гПа.

Острая токсичность, по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики). Firm. (1992) вырабатывает циклопентадеканон с т. пл.⩾63 °С и т. всп. >100 °С.

В соответствии со спецификацией GIV (1989) продажный продукт содержит не менее 98% (ГЖХ) циклопентадеканона и имеет т. пл. ⩾64 °С; т. всп.>100 °С.

Пути промышленного синтеза циклопентадеканона, недавно рассмотренные в книге Г. Олоффа (Ohloff G., Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verlag, 1990, с. 200), мало пригодны для крупного производства. Поэтому циклопентадеканон остается малотоннажным дорогим продуктом.

Используется в парфюмерных композициях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

5.19. Мускон

3-Метилциклопентадеканон, Muscone (Arc. 2276, Firm.), 3-Methylcyclopentanone (RIFM). $C_{16}H_{30}O$; 238,42

С.А. 541-91-3

Содержится в натуральном мускусе. Запах — мягкий, приятный, мускусный. Вязкая жидкость, т. кип. 128 °С/1,6 гПа; 110–111 °С/0,05 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982) : oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

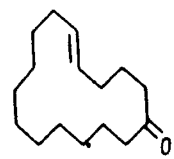
Продажный продукт Firm. (1983) содержит не менее 94% (ГЖХ) мускона и имеет d_{20}^{20}0,918–0,925; n_D^{20}1,477–1,483; т. всп.>100 °С.

Несмотря на то, что описано много способов синтеза мускона (Ohloff G., Riechstoffe und Geruchssinn, Springer-Verlag, 1990, p. 200; Tsuji J. и др., Tetrahedron Lett. 1979, № 24, 2257, РЖХ, 1980, IE172), крупное промышленное производство этого продукта осуществить довольно трудно. В настоящее время появился ряд аналогов по запаху, более приемлемых для производства.

Используется в очень небольших дозах в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

5.20. 5-Циклогексадеценон

Musk TM (Soda Aromatic), Ambretone (ТАК). $C_{16}H_{28}O$; 236,40



С.А. 37609-25-9

Запах — сильный, мускусный. Жидкость, т. кип. 129–131 °С/2,7 гПа, смесь *цис-транс*-изомеров (4:6).

Продажный продукт ТАК (1987) содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси *цис-транс*-изомеров и имеет d_{25}^{25} 0,930–0,935; n_D^{20}1,485–1,495; т. всп. 167 °С.

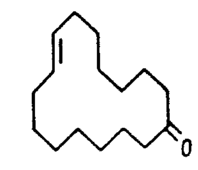
Получают оксиперегруппировкой Коупа 1,2-дивиниилциклододеканола, который может быть получен из циклододеканона (Miyake A. и др., японский пат. 52-39025, 27.09.72–3.10.77, РЖХ, 1978, 17Р539П; пат. США 3914315, 20.09.73–21.10.75, РЖХ, 1976, 15Р634П; Komatsu A. и др., пат. США 3923699, 29.12.71–2.12.75, РЖХ, 1977, 7Р641П; пат. США 3929893, 21.02.74–30.12.75, РЖХ, 1976, 21Р508П).

Объем производства составляет несколько сот тонн в год.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

5.21. 8-Циклогексадеценон

Cyclohexadecenone (Wacker). $C_{16}H_{28}O$; 236,40



С. А. 3100-36-5

Запах — мускусный, с цветочной нотой. Твердая масса, т. пл. 30°C; т. кип. 120°C/0,13 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% (ГЖХ) смеси изомерных кетонов и имеет d_4^{30} ~0,923; n_D^{30} 1,480–1,490; т. всп. 160°C.

Промышленный способ синтеза 8-циклогексадеценона базируется на оригинальном варианте метода метатезиса циклооктена и последующем превращении полученного циклогексадекадиена в искомый кетон (Eberle H. J. и др., заявка ФРГ 3524977, 12.07.85–22.05.86, Chem. Abstr. 1986, 105, 174798; Warwel S. и др., Seifen-Öle-Fette-Wachse, 1989, 115, № 15, с. 538).

$[Re_2O_7/Al_2O_3]$

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Wacker рекомендует этот продукт для замены мускуса амбрового. Ограничений IFRA нет.

5.22. Цибетон

9-Циклогептадеценон, Civettone (Arc. 700, Firm.), Civeton (RIFM). $C_{17}H_{30}O$; 250,43

C. A. 542-46-1

Содержится в натуральном цибете.

Запах — сильный, животно-мускусный. Жидкость или кристаллическая масса, т. пл. 32,5°C; т. кип. 158–160°C/2,7 гПа.

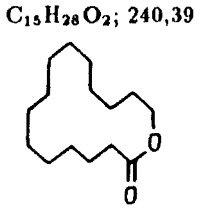
Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Продажный продукт Firm. (1983) представляет собой жидкость, содержащую не менее 90% (ГЖХ) суммы *цис-транс*-изомеров цибетона, имеет d_{20}^{20} 0,923–0,940; n_D^{20} 1,485–1,492; т. всп. >100°C.

5.23–5.32. МАКРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ЛАКТОНЫ И ОКСАЛАКТОНЫ

5.23. Пентадеканолид

15-Пентадеканолид, циклопентадеканолид, Cyclopentadecanolide (Arc. 811, RIFM, H.+R), Exaltolide, Exaltex (Firm.), Thibetolide (GIV), Dragolide (Dragoco). $C_{15}H_{28}O_2$; 240,39



C. A. 106-02-5

Содержится в ЭМ корней ангелики.

Запах — тонкий, мускусный. Кристаллическая масса, т. пл. 37–38°C; т. кип. 175°C/20 гПа; 169°C/13–14 гПа, P_{20} $3{,}5 \cdot 10^{-4}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Классические методы синтеза цибетона, разработанные Л. Ружичкой и М. Штоллем, не очень пригодны для промышленного производства. Цибетон остается малотоннажным дорогим продуктом.

Используется в парфюмерных композициях при дозировке до 1%. Эффективен при очень малых концентрациях порядка 0,01%. Ограничений IFRA нет.

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C	Дополнительные данные
Firm., 1983	96	30	>100	
GIV, 1986	99	35	>100	
H.+R., 1988	99	35	164	
Dragoco	95	–	>110	d_4^{20} 0,939–0,949; n_D^{20} 1,465–1,474.
Firm., 1979, 1992 (Exaltex)	65	–	>100	d_{20}^{20} 0,970–0,980; n_D^{20} 1,490–1,496.

Промышленный синтез пентадеканолида осуществляют различными способами. Самое крупное производство (до 100 т/год) действует по схеме циклододеканон — оксабициклогексадецен — гидропероксид оксабициклогексадекана — пентадеканолид (Becker J. J., швейц. пат. 557813, 27.05.70–15.01.75, РЖХ, 1975, 16Р396П; Becker J. J., Ohloff G., Helv. chim. acta 1971, 54, № 8, с. 2889).

Другой вариант состоит во взаимодействии оксабициклогексадецена с изоамилнитритом, превращении полученного моноциклического оксима в кетолактон, переход от которого к пентадеканолиду возможен либо через 15-гидроксипентадекановую кислоту (Bauer K., Körber A., заявка ФРГ 2731543, 13.07.77–18.01.79, РЖХ, 1980, 2Р490П), либо каталитическим гидрированием, дегидратацией гидроксипроизводного и повторным гидрированием (Войткевич С. А. и др., авт. свид. 1133274, 14.05.82–7.01.85).

Способ получения 15-гидроксипентадекановой кислоты радикальным присоединением додекандиола-1,12 к метилакрилату и последующим гидрогенолизом *гамма*-лактона является как бы возвратом к классическим методам синтеза пентадеканолида (Suzuki K. и др., японск. заявка 53–132521, 26.04.77–18.11.78, РЖХ, 1979, 21Р536П; РЖХ 1981, 8Е184, В. Н. Белов и др., Труды ВНИИСНДВ, 1958, вып. IV, с. 3).

Пентадеканолид широко используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Эффективен при использовании в малых концентрациях порядка 0,1%. Ограничений IFRA нет.

5.24. Амбреттолид

7-Гексадецен-16-олид, Ambrettolide (Arc. 105, RIFM, GIV, IFF). $C_{16}H_{28}O_2$; 252,40

С. А. 28645-51-4

Содержится в ЭМ *Abelmoschus moschatus M.*

Запах — мускусный, с цветочной нотой, стойкий. Жидкость, т. кип. 154–156°С/1,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1987	97	0,949–0,956	1,475–1,482	97
IFF, 1992	98	0,949–0,957	1,477–1,482	>100

Используют в небольших дозах (до 2%) в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

5.25. Гексадеканолид

16-Гексадеканолид, дигидроамбреттолид, Dihydroambrettolide (Arc. 923), Hexadecanolide (RIFM, IFF). $C_{16}H_{30}O_2$; 254,42

С. А. 109-29-5

Запах — мускусный, стойкий со слабым жирным оттенком. Кристаллическая масса, т. пл. 33–34°С, т. кип. 188°С/20 гПа, P_{20} $4,3\cdot10^{-4}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) гексадеканолида и имеет т. пл. ≥30°С; n_D^{20} 1,468–1,473 (переохл.); т. всп. >100°С.

Может быть получен циклизацией 16-гидроксипальмитиновой кислоты. Последняя может быть получена микробиологическим окислением пальмитиновой кислоты.

Возможно также получение гексадеканолида окислением циклогексадеканона по Байеру—Виллигеру.

Используют в сравнительно небольшом числе парфюмерных композиций при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

5.26. 12-Оксопентадеканолид

2-Оксациклогексадекан-1,6-дион, Ketodecanolid (H.+R.). $C_{15}H_{26}O_3$; 254,38

С. А. 38223-29-9

Запах — мускусный, с древесной и растительной нотами. Кристаллическая масса. т. пл. 32,5–33°С; т. кип. 140–145°С/0,3 гПа.

Продажный продукт H.+R. (1990) — Ketodecanolid 50% — представляет собой 50%-ный раствор названного кетона в смеси изопропилмиристат — дипропиленгликоль (3:2). Этот раствор имеет d_{25}^{25} 0,960–0,966; n_D^{20} 1,452–1,458; т. всп. 118°С. Кроме способа Бауэра—Кербера (см. пентадеканолид) запатентовано несколько вариантов синтеза кетодеканолида из оксабициклогексадецена (Hopp R., Bauer K., заявка ФРГ 2410859, 7.03.74–18.09.75, РЖХ, 1976, 18Р617П; Bartmann M., Burzin K., заявка ФРГ 3224707, 2.07.82–5.01.84, РЖХ, 1985, 7Р522).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.27. Оксалактон 2-11

12-Оксатетрадекан-14-олид, 2,5-диоксациклопентадеканон, Oxalactone 2-11 (РФ). $C_{13}H_{24}O_3$; 228,32

Запах — мускусно-древесный, резкий. Жидкость, т. кип. 143–145°С/10,7 гПа, P_{20} $1{,}76 \cdot 10^{-3}$ гПа.

В соответствии со спецификацией РФ (1980) продажный продукт имеет ЭЧ 240–250; КЧ <3; d_4^{20} 1,006–1,008; n_D^{20} 1,468–1,469.

Получают взаимодействием 11-хлор- или бром-ундекановой кислоты с моногликолятом натрия и последующей циклизацией образовавшейся гидроксиоксакислоты (Несмеянов А. Н. и др., журн. ВХО им. Менделеева, 1960, 5, № 4, с. 371, Фролкина М. В. и др., Пищевая пром-сть, 1991, № 6, с. 57; РЖХ, 1991, 22Р2053).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

5.28. Оксалактон 4-11

12-Оксагексадекан-16-олид, 2,7-диоксациклогептадеканон, 12-Oxahexadecanolide (Arc. 2455, RIFM), Hibiscolide (Roure), Cervolide (Quest), Musk 781 (IFF), Oxalactone 4-11 (РФ). $C_{15}H_{28}O_3$; 256,39

С. А. 6707-60-4

Запах — мускусный, с легкой фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 170°С/6,7 гПа; 140–142°С/2,7 гПа; $P_{20} 2{,}2 \cdot 10^{-4}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure	–	~0,982	20/20	~1,468	165
Quest, 1989	98 (ГЖХ)	0,982–0,986	20/20	1,467–1,469	151
РФ, 1980	218–225 (ЭЧ)	0,985–0,990	20/4	1,468–1,469	–
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,979–0,987	20/4	1,466–1,470	>100

Простейший способ производства состоит в получении натрового производного 1,4-бутандиола, его взаимодействии с 11-хлор- или бромундекановой кислотой и последующей циклизации образующейся гидроксиоксакислоты (Соловьева Н. П. и др., Масло-жировая пром-сть, 1961, № 5, с. 34).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

5.29. Оксалактон 5-10

11-Оксагексадекан-16-олид, 2,8-диоксациклогептадеканон, 11-Oxahexadecanolide (Arc. 2444, RIFM), Musk R-1 (Naarden-Quest), Oxalactone 5-10. $C_{15}H_{28}O_3$; 256,39

С. А. 3391-83-1

Запах — мускусный. Кристаллическая масса, т. пл. 35°С.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики); по данным Naarden — oral. LD_{50} 16,8 мл/кг.

Продажный продукт Quest содержит не менее 98% оксалактона 5–10 и имеет т. заст.⩾30°C; т. всп. 166°C.

Получают из 1,5-пентандиола и метилового эфира 10-бромдекановой кислоты с последующим образованием макроцикла.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

5.30. Оксалактон 6-9

10-Оксагексадекан-16-олид, 2,9-диоксациклогептадеканон, 10-Oxahexadecanolide (Arc. 2443), Oxalide T (TAK).

$C_{15}H_{28}O_3$; 256,39

C. A. 1725-01-5

Запах — мускусно-животный. Жидкость, т. кип. 160–161°C/6,7 гПа.

Острая токсичность, по данным TAK (1987): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт TAK (1987) содержит 95% (ГЖХ) оксалактона 6–9 и имеет d_{25}^{25} 0,975–0,985; n_D^{20} 1,465–1,470; т. всп. 149°C. Может быть получен по общей схеме синтеза оксалактонов из 1,6-гександиола и 9-хлорнонановой кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

5.31. Мусконат

Этилендодекандиоат, 2,5-диоксациклогексадекан-1,6-дион, Musc C-14 (TAK), Arova N (Hüls), Attractolide (Dragoco).

$C_{14}H_{24}O_4$; 256,34

C. A. 54982-83-1

Запах — мягкий, мускусный, стойкий. Жидкость, т. заст. 19°C; т. кип. 154–156°C/2,7 гПа; P_{20} $8,0 \cdot 10^{-5}$ гПа.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ: oral LD_{50} 4,7 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Hüls, 1990	98	~1,059	20/4	–	175
TAK, 1987	95	1,055–1,065	20/20	1,465–1,480	168
Dragoco, 1989	–	1,047–1,057	20/4	1,467–1,477	150
РФ, 1990	95	~1,060	20/4	1,470–1,473	–

Получают из 1,12-додекандикислоты и этиленгликоля путем поликонденсации и термической деполимеризации (260–270°C) при непрерывной подаче этиленгликоля и отгонке в вакууме азеотропа этиленгликоля с мусконатом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

5.32. Этиленбрассилат

Этилентридекандиоат, 2,5-диоксациклогептадекан-1,6-дион, Ethylene brassilate (Arc. 1214, RIFM) Musk BRB (R.-P.), Musk T (TAK).

$C_{15}H_{26}O_4$; 270,38

C. A. 105-95-3

Запах — приятный, мускусный, немного маслянистый, стойкий. Жидкость, т. пл. 5°C; т. кип. 332°C/1013 гПа; 138–142°C/1,3 гПа; $P_{20}3,3 \cdot 10^{-5}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{25}	Т.всп., °C
R.-P., 1965	100 (омыл.)	1,044–1,045	20/20	–	–
TAK, 1987	93 (ГЖХ)	1,040–1,047	25/25	1,468–1,474	200

Получают поликонденсацией брассиловой кислоты с этиленгликолем и последующей термической деполимеризацией. Брассиловая кислота может быть получена путем озонолиза эруковой кислоты, содержащейся в виде триглицерида в рапсовом масле. Объем производства этиленбрасснлата в 70-е годы превышал 100 т в год.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6. АРОМАТИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ

6.1–6.37. УГЛЕВОДОРОДЫ, ГАЛОИДПРОИЗВОДНЫЕ, СПИРТЫ, ПРОСТЫЕ ЭФИРЫ

6.1. Пропенилцимол

1-Метил-2-пропенил-4-изопропилбензол, 1-Methyl-2-propenyl-4-iso-propylbenzene (Arc. 2208), 4-Isopropyl-1-methyl-2-propenylbenzene (RIFM), Verdoracine (Naarden—Quest).

$C_{13}H_{18}$; 174,28

C.A. 14374-92-6

Запах — свежей зелени с оттенками запаха земли, гальбанума, ветиверии. Жидкость, т. кип. 100°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral. LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики). По данным Naarden (1985): oral LD_{50} > 10 мл/кг (крысы).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного углеводорода и имеет d_{20}^{20} $0,889 - 0,891$; n_D^{20} $1,527 - 1,529$; т. всп. 80°С.

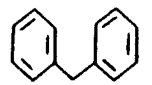
Получают ацилированием *пара*-цимола пропионилхлоридом по Фриделю—Крафтсу и последующими гидрированием полученного кетона до спирта и дегидратацией последнего (Toet H. J. и др., голл. пат. 125892, 14.06.65–17.02.69, РЖХ, 1970, 5Р854П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.2. Дифенилметан

Бензилбензол, Diphenyl methane (Arc. 1080, GIV), Diphenylmethane (RIFM, BBA, H.+R.)

$C_{13}H_{12}$; 168,24



C.A. 101-81-5

Запах — грубый, листьев герани, при разбавлении — более приятный. Кристаллическое вещество, т. пл. 26–27°С; т. кип. 261–262°С/1013 гПа; 158°С/47 гПа; 120°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,25 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Чистота (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20} (переохлаждение)	Минимальная т. заст., °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	—	1,003–1,005	1,576–1,577	24,5	>100
H.+R., 1988	98	1,001–1,006	1,575–1,578	24,5	130
BBA, 1990	98	—	—	24,5	130

Получают по Фриделю—Крафтсу из хлористого бензила и бензола или из метиленхлорида и бензола.

Используется главным образом в отдушках для мыла и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

6.3. Бромстирол

1-Бром-2-фенилэтилен, *omega*-Bromstyrol (Arc. 371), Bromstyrol (RIFM, GIV).

C_8H_7Br; 183,06

C.A. 103-64-0

Запах сильный, цветочный (гиацинта), зелени. Жидкость, т. кип. 108°С/27 гПа, смесь (Е)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 1,25 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 6 мл/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый GIV (1987), содержит не менее 96% (ГЖХ) бромстирола (сумма двух изомеров) и имеет d_4^{20} 1,417–1,426;

n_D^{20} 1,605–1,609; т всп. 98°С. Получают бромированием коричной кислоты и последующим дегидробромированием и декарбоксилированием дибромкоричной кислоты (Шорыгин П. П. и др., Журн. общ. хим., 1931, 1, № 3-4, с. 506).

Используют в отдушках для мыла и моющих средств при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

6.4. Метилфенилдихлорциклопропан

1-Метил-1-фенил-2,2-дихлорциклопропан, Cyclorosan (H.+R.) — $C_{10}H_{10}Cl_2$; 201,09

C.A. 3591-42-2

Запах — очень сильный, резкий, зелени, травы, листьев герани. Продажный продукт H.+R. (1988) представляет собой жидкость, содержащую не менее 98% (ГЖХ) названного дихлорида и имеющую т. заст. ≥11°С; d_{25}^{25} 1,186 – 1,189; n_D^{20} 1,540 – 1,543; т. всп. ~140°С.

Может быть получен взаимодействием *альфа*-метилстирола с хлороформом в условиях катализа фазового переноса.

Используют в небольших дозах при изготовлении отдушек различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.5. Бензиловый спирт

Фенилкарбинол, Benzyl alcohol (Arc. 290, GIV, RIFM, BBA, Quest, H.+R.), Bentalol (BBA) — C_7H_8O; 108,14

C.A. 100-51-6

Содержится в ЭМ крупноцветного жасмина, иланг-иланга, ириса, нероли, а также в стираксе и бальзамах (перуанском, толуанском).

Запах — слабый, ароматичный с легким миндальным оттенком, сладковатый. Жидкость, т. пл. -15°С; т. кип. 205,4°С/1013 гПа; 93°С/13,3 гПа; P_{20} 0,10 гПа; γ_{20} 38,3 дин/см; σ_{20} 6,1 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 2,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 мл/кг (морские свинки).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	1,041–1,046	25/25	1,539–1,541	100	Cl отсутствует
H.+R., 1988	98,5	1,041–1,046	25/25	1,538–1,541	94	Cl отсутствует
BBA, 1985	98	1,043–1,046	20/4	1,539–1,541	96	Бензальдегид <0,1%
BBA, 1985	99	1,045	20/4	1,540	—	Bentalol
BBA, 1990	99	1,044–1,046	20/4	1,539–1,541,	96	Сорт PQ, бензальдегид <0,1%
Quest, 1989	—	1,042–1,047	25/25	1,539–1,541	94	
РФ, 1990	98	1,045–1,050	20/4	1,538–1,540	90	

Бензиловый спирт получают чаще всего омылением бензилхлорида водным раствором соды при температуре 100–105°С, контролируя содержание хлора в продукте омыления. В качестве побочного продукта образуется дибензиловый эфир. Вакуум-ректификацией полученной смеси удается выделить продукт, пригодный для парфюмерии.

Технология, основанная на окислении толуола воздухом, как правило, приводит к получению смесей бензилового спирта и бензальдегида, содержащих примеси крезолов. Выделение парфюмерного продукта из таких смесей сопряжено с определенными трудностями. Возможно получение бензилового спирта восстановлением бензальдегида.

Бензиловый спирт широко используется как компонент парфюмерных композиций и как полупродукт синтеза душистых веществ, в частности, сложных эфиров. Ограничений IFRA нет.

6.6. 4-Метилбензиловый спирт

пара-Метилбензиловый спирт, *para*-Tolyl alcohol (Arc. 2958), p-Tolylalcohol (BASF). — $C_8H_{10}O$; 122,17

C.A. 589-18-4

Запах — слабый приятный, сладко-бальзамический с оттенком запаха зелени. Кристаллы или порошок, т. пл. 58°С.

Продажный продукт (BASF, 1987) имеет т. кип. 222°C/1013 гПа; чистоту ≥98% (ГЖХ); d_{25}^{25} 1,070–1,074 (переохлажд.); т. всп. 106°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках, а также для получения 4-метилбензилацетата. Ограничений IFRA нет.

6.7. Фенилэтиловый спирт

2-Фенилэтанол, *бета*-фенилэтиловый спирт, Phenylethyl alcohol (Arc. 2513, RIFM, GIV, IFF, BASF), *beta*-Phenylethyl alcohol (H.+R.), Mellol (BBA), Phenethyl alcohol (R.-P.).

$C_8H_{10}O$: 122,17

OH

C.A. 60-12-8

Содержится в ЭМ розы, герани, иланг-иланга, нероли и др. Запах — мягкий, цветочный, напоминает запах розы.

Жидкость, т. кип. 219,8°C/1013 гПа; 99,5°C/13,3 гПа; т. пл. -25,8°C; P_{20} 4,4 · 10^{-2} гПа; γ_{20} 38,7 дин/см; σ_{20} 14,1 спуаз. Растворимость в воде 1:50.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 1,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5–10 мл/кг (морские свинки).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	1,018–1,021	20/4	1,531–1,534	>100	
IFF, 1992, White extra	99	1,016–1,024	20/4	1,530–1,534	>100	Сорт "coeur" аналогичен
BASF, 1987	99,5	1,017–1,020	25/25	1,531–1,534	102	
H.+R., 1988, сорт N	98	1,017–1,020	25/25	1,531–1,534	>100	
H.+R., 1988, pure	98,5	1,017–1,020	25/25	1,531–1,534	>100	
РФ, 1990, высший сорт	99,97	1,021–1,025	20/4	1,531–1,533	107	Чистота определяется ГЖХ без учета количества воды
BBA, Mellol	98	1,019–1,021	20/20	1,532–1,534	102	
BBA, extra	98	1,018–1,021	20/20	1,531–1,534	102	
R.-P., 1981	99	1,017–1,023	20/20	~1,533	102	

В небольших масштабах использовался способ производства фенилэтилового спирта путем восстановления этилового эфира фенилуксусной кислоты по Буво—Блану. Получаемый продукт имел хорошее парфюмерное качество. Основным способом крупнотоннажного производства фенилэтилового спирта является конденсация бензола с оксидом этилена по Фриделю—Крафтсу. Преимущества метода — хороший выход целевого продукта, дешевизна исходного сырья. Недостатки — токсичность бензола и оксида этилена, необходимость использования больших количеств хлористого алюминия, трудность очистки от хлорсодержащих примесей, некоторые из которых, например 2-фенилэтилхлорид, даже в очень малых концентрациях искажают запах товарного продукта. В РФ производство фенилэтилового спирта существует с 1940 г. (Ю. И. Дучинская, А. Г. Чебышев. Производство СДВ, 1959, с. 25; Н. Н. Зеленецкий и др., Масло-жировая пром-сть, 1980, № 3, с. 32). Перспективен способ восстановления оксида стирола (например, Н. Е. Кологривова, и др., авт. свид. СССР № 1055734, заявл. 24.07.79 — опубл. Б. И., 1983, № 43), при котором очистка довольно проста. Реализация этого способа возможна при организации крупного производства дешевого оксида стирола.

Фенилэтиловый спирт в больших количествах используется в парфюмерии и при создании отдушек различного назначения при дозировке до 40%. Он служит сырьем для получения фенилацетальдегида, ряда сложных эфиров и т. п. Ограничений IFRA нет.

6.8. Метилфенилкарбинол

1-Фенилэтанол, *альфа*-фенилэтиловый спирт, Styralyl alcohol, Methyl phenyl carbinol (Arc. 2175, GIV), Styrallyl alcohol pure (H.+R.)

$C_8H_{10}O$; 122,17

OH

C.A. 98-85-1

В виде ацетата найден в экстракте цветов гардении.

Запах — цветочный, гардении, розы, резкий с фруктовый и фенольным оттенками. Жидкость (при температуре >20°C), т. кип. 203,5°C/1013 гПа, 78°C/6,7 гПа; γ_{20} 27,1 дин/см, σ_{20} 15,3 спуаз.

Острая токсичность по данным Merck (1992): oral LD_{50} 0,4 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С	Т. заст., °С
GIV, 1961	—	1,010–1,013	1,526–1,529	92	19
H.+R., 1988	98	1,010–1,013	1,526–1,529	98	>20

Простейший путь получения в промышленных масштабах — каталитическое гидрирование ацетофенона.

В небольших количествах используется в парфюмерных композициях и отдушках. Бóльшая часть перерабатывается в стиралилацетат и стиралилпропиоат. Ограничений IFRA нет.

6.9. Этилфенилкарбинол

1-Фенилпропанол, *альфа*-фенилпропиловый спирт, Phenyl ethyl carbinol (Arc. 2520), Ethyl phenyl carbinol (H.+R.). $C_9H_{12}O$; 136,20

C.A. 93-54-9

Запах — приятный цветочно-бальзамический, более сильный, чем запах 3-фенилпропанола. Жидкость, т. кип. 220°С/1013 гПа; 106°С/22 гПа.

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит карбинола не менее 97% (ацетил.) и имеет d_{25}^{25} 0,991–0,994; n_D^{20} 1,520–1,523; т. всп. 95°С.

Обычно получают каталитическим гидрированием пропиофенона.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.10. Гидратроповый спирт

2-Фенилпропанол, *бета*-фенилпропиловый спирт, Hydratropyl alcohol (Arc. 1707), Hydratropic alcohol (RIFM, BASF, IFF), 2-Phenyl-1-propanol (Hüls). $C_9H_{12}O$; 136,20

C.A. 1123-85-9

Запах — цветочный, жимолости, оттенки запаха корицы, гиацинта. Жидкость, т. кип. 201–203°С/1010 гПа, 114°С/19 гПа, 85°С/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Т. заст., °С
BASF, 1987	99	0,999–1,005	25/25	1,526–1,528	108	
Hüls, 1990	98	~0,975	20/4	—	93	<–30
IFF, 1992	97	0,997–1,005	25/25	1,524–1,529	>100	

Гидратроповый спирт — малотоннажный продукт. Получают восстановлением гидратропового альдегида или из *альфа*-метилстирола через алюминийорганическое соединение (А. М. Сладков, Л. К. Луиева. Журн. общ. хим., 1958, 28, с. 2895).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.11. Фенилпропиловый спирт

3-Фенилпропанол, гидрокоричный спирт, *гамма*-фенилпропиловый спирт, 3-Phenyl propyl alcohol (Arc. 2589), Phenylpropyl alcohol (RIFM, GIV, H.+R.), 3-Phenylpropanol FCC (BASF), 3-Phenyl-1-propanol (Hüls). $C_9H_{12}O$: 136,20

C. A. 122-97-4

Найден в перуанском бальзаме, бензойной смоле и некоторых ЭМ.

Запах — мягкий, цветочно-бальзамический, оттенок запаха гиацинта. Жидкость, т. кип. 235°С/1013 гПа; 120–121°С/17 гПа; P_{20} $2{,}0\cdot10^{-2}$ гПа; γ_{20} 38,3 дин/см; σ_{20} 19,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 2,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1986	98	0,998–1,002	20/4	1,524–1,528	>100	Содержание альдегида <0,5%
H. + R., 1988	98	0,998–1,002	25/25	1,524–1,527	112	
BASF, 1988	98	0,998–1,002	25/25	1,524–1,528	100	
Hüls, 1990	98	1,001	20/4	—	129	Т. заст. <–50°С

В природных смолах и ЭМ фенилпропиловый спирт обычно находится вместе с коричным спиртом. Обработка смеси концентрированной муравьиной кислотой дает формиат фенилпропилового спирта. Коричный спирт при этом осмоляется.

Промышленные методы получения: традиционный — гидрированием коричного альдегида или коричного спирта; современный — путем превращения стирола в 4-фенил-1,3-диоксан и последующего гидрогенолиза (Beets M. G. J., Rec. Trav. Chim., 1951, 70, № 20, с. 343; Дучинская Ю. И., Чебышев А. Г., Производство СДВ, 1959, с. 32).

Используется в парфюмерных композициях и в большей степени в отдушках для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет.

6.12. Куминовый спирт

4-Изопропилбензиловый спирт, Cuminalcohol (Arc. 752), Cuminyl alcohol (RIFM, IFF). $C_{10}H_{14}O$; 150,22

С. А. 536-60-7

Найден в ЭМ камфарного дерева, лаваиды, некоторых сортов эвкалипта

Запах — пряный, родственный тмину, с оттенками запаха цветов, кожи. Жидкость, т. кип. 248°С/1013 гПа, 120–121°С/15 гПа

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) имеет чистоту ≥97% (ГЖХ, сумма изомеров), в том числе *пара*-изомера ≥90%; d_4^{20}0,971 – 0,979, n_D^{20} 1,516–1,522; т. всп. >100°С.

Получают восстановлением куминового альдегида.

В небольших количествах используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.13. Метилфенилэтиловый спирт

2-[4(2,3)-Метилфенил]-этанол, Methyl phenylethyl alcohol (Arc. 2190, 2191), Syringa alcohol, Hawthanol (IFF), Tolitol-o,p,m (IFF). $C_9H_{12}O$; 136,20

С. А. 1975-89-4

Запах — комплекс цветочных нот розы, жасмина, сирени с древесным оттенком. Жидкость, смесь *пара-*, *мета-* и *орто*-изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) имеет чистоту ≥95% (ГЖХ, сумма изомеров) d_4^{20}0,998 – 1,006; n_D^{20} 1,527–1,532; т. всп. >100°С.

Используется главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.14. Метил-п-толилкарбинол

1-(4-Метилфенил)-этанол, п-метил-*альфа*-фенилэтиловый спирт, Methyl-*para*-tolylcarbinol (Arc. 2247, H.+R.). $C_9H_{12}O$; 136,20

С. А. 536-50-5

Содержится в ЭМ *Curcuma domestica*.

Запах — миндаля, ноты цветов и сена, мятный оттенок. Жидкость, т. кип. 219°С/1008 гПа, 134°С/53 гПа, 108°С/16 гПа.

Продажный продукт H. + R. (1988) содержит карбинола минимум 89% (ацетил.) и имеет d_{25}^{25}0,985 – 0,989; n_D^{20} 1,520–1,524; т. всп. 102°С.

Получают восстановлением *пара*-метилацетофенона.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.15. Коричный спирт

3-Фенил-2-пропенол, Cinnamic alcohol (Arc. 618, RIFM, GIV), Cinnamyl alcohol (BBA), Zimtalkohol FCC (BASF).

$C_9H_{10}O$; 134,18

OH

C. A. 104-54-1

Найден в стираксе, некоторых бальзамах и ЭМ.

Запах — бальзамический, сладко-цветочный с нотой запаха гиацинта. В *транс*-форме — кристаллическая масса, т. пл. 34,5°С; т. кип. 258°С/1013 гПа; 117°С/6,7 гПа; $P_{20}1,5\cdot10^{-3}$ гПа; d_4^{20} 1,044 (переохл.); n_D^{20} 1,582 (переохл.). В *цис*-форме — жидкость, т. кип. 127–128°С/13,3 гПа; $d_4^{20}1,041$; n_D^{20} 1,570.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	Содержание коричного альдегида,%	Т. заст., °С	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	98	<1,5	⩾33	>100	
РФ, 1990	98	<0,8	⩾31	134	
BBA, 1990	98	<1	⩾33,5	132	Содержание коричной кислоты <0,15%
BASF, 1988	98	<1,5	—	93	

Промышленный синтез коричного спирта чаще всего осуществляют восстановлением коричного альдегида по Меервейну—Понндорфу—Верлею. Донором водорода служит изопропиловый или бензиловый спирт. Использование последнего позволяет возвращать в производственный цикл образующийся бензальдегид, который является исходным сырьем для получения коричного альдегида (Ю. И. Дучинская, А. Г Чебышев, Производство синтетических душистых веществ, 1959, с. 35).

Каталитическое гидрирование коричного альдегида до коричного спирта требует подбора специальных селективно действующих катализаторов, так как всегда сопровождается образованием 3-фенилпропанола и 3-фенилпропаналя.

Известный по патентам способ синтеза по схеме стирол—циннамилхлорид—коричный спирт, по-видимому, не нашел промышленного применения.

Коричный спирт в больших количествах используется в парфюмерии, производстве разнообразных отдушек и для изготовления пищевых ароматических эссенций. IFRA рекомендует вводить в композиции и отдушки не более 4% коричного спирта.

6.16. Метилкоричный спирт

2-Метил-3-фенил-2-пропенол, *бета*-метилкоричный спирт, кориниол, Methylcinnamic alcohol (Arc. 1950, RIFM, EOA)

$C_{10}H_{12}O$; 148,21

OH

C. A. 1504-55-8

Запах — бальзамическо-цветочный с оттенком стиракса. Жидкость, т. заст. 18°С. Входит в состав продажного продукта "Cinalkex" (IFF).

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,4 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

По данным EOA, коммерческий продукт должен иметь следующие показатели: т. заст. ⩾18°С; чистота ⩾97%; содержание альдегидов <1%; $d_{25}^{25}1,024-1,030$; n_D^{20} 1,571–1,574.

Получают конденсацией бензальдегида с пропионовым альдегидом и последующим восстановлением *альфа*-метилкоричного альдегида.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.17. 2,2-Диметил-3-фенилпропанол

бета, бета-Диметилгидрокоричный спирт, Muguetalkohol (Dragoco).

$C_{11}H_{16}O$; 164,25

OH

Запах — слабый, цветочный, с нотой ландыша, химический оттенок. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. кип. 92–94°С/4 гПа,

d_4^{20}0,980; n_D^{20} 1,518. Коммерческий продукт Dragoco (1989) имеет чистоту ≥95% (ГЖХ); d_4^{20}0,972 – 0,982; n_D^{20} 1,515–1,525; т. всп. >110°С.

Синтез осуществляют каталитическим гидрированием 2,2-диметил-3-фенилпропионового альдегида, метод получения которого предложен А. В. Гуревич и сотр. (Масло-жировая пром-сть, 1980, № 12, с. 29).

Использование продукта в парфюмерии запатентовано (E.-J. Brunke, E. Klein, заявка ФРГ 3139358, 2.10.81–21.04.83, РЖХ, 1984, 12Р457П; пат. США 4490284, 29.09.82–25.12.84, РЖХ, 1985, 19Р530П). Ограничений IFRA нет.

6.18. Майантол

2,2-Диметил-3-(3-метилфенил)-пропанол, *мета*-метил-*бета*, *бета*-диметилгидрокоричный спирт, Majantol (Wacker). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

С. А. 103694-68-4

Запах — свежий, цветочный, напоминает запах ландыша, стойкий. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. пл. ~22°С; т. кип. 74–76°С/0,13 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) имеет чистоту ~98% (ГЖХ); d_{25}^{25} ~ 0,960; n_D^{25} 1,515–1,518; т. всп. 133°С.

Получение основано на алкилировании изомасляного альдегида *мета*-метил-бензилхлоридом в условиях катализа фазового переноса и на последующем восстановлении полученного альдегида (Hafner W. и др., заявка ФРГ 3531585, 4.09.85–5.03.87, РЖХ, 1987, 24Н101П).

В парфюмерные композиции и отдушки может быть введен в количестве до 40%. Ограничений IFRA нет.

6.19. 3-Метил-5-фенилпентанол

3-Methyl-5-phenylpentanol (Arc. 2200), Phenylhexanol (Firm), Phenoxanol (IFF), Phenoxaflor (IFF). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

С. А. 55066-48-3

Запах — цветочный, типа розы, оттенки — бальзамический, зелени, стойкий Жидкость, продажный продукт IFF (1992) имеет чистоту ≥. 7% (ГЖХ), d_{25}^{25}0,954 – 0,962, n_D^{20} 1,509–1,514, т. всп. >100°С. Продукт Firm. (1992) имеет d_{20}^{20} 0,960–0,964; n_D^{20} 1,511–1,514; т. всп >100°С.

Острая токсичность по данным IFF (1992): oral LD_{50} 2,3 г/кг, derm. LD_{50} 3,1 г/кг.

"Phenoxaflor" (IFF) представляет собой 3-метил-5-фенилпентанол с небольшой добавкой *бета*-дамаскона или дамасценона. (Schmitt F., пат. США 4217253, 13.07.79–12.08.80, РЖХ, 1981, 8Р492).

Получение можно осуществить по методу Firm. (C. Tarchini, швейц. пат. 655932, 24.02.83–30.05.86, РЖХ, 1987, 3Р545П) путем взаимодействия бензальдегида с изобутенилкарбинолом с последующим гидрогенолизом образующегося 4-метилен-2-фенилтетрагидропирана.

Ввод в парфюмерные композиции и отдушки обычно не превышает 20%. Ограничений IFRA нет.

6.20. 2-Метил-5-фенилпентанол

2-Methyl-5-phenylpentanol-1 (Arc. 2196), Rosaphen (H.+R.) $C_{12}H_{18}O$; 178,27

С. А. 111850-00-1

Запах — цветочный, типа розы, смолистый оттенок, стойкий. Продажный продукт H. + R. (1988) — жидкость; d_{25}^{25} ~ 0,960; n_D^{20} ~1,512; т. всп. >117°С.

Получить можно конденсацией 3-фенилпропаналя с пропионовым альдегидом и последующим каталитическим гидрированием.

2-Метил-5-фенилпентанол с добавкой 0,03% *бета*-дамаскона приобретает оттенок запаха розового масла.

Ввод в парфюмерные композиции и отдушки обычно не превышает 10%. Ограничений IFRA нет.

6.21. Амилкоричный спирт

2-Пентил-3-фенил-2-пропенол, *бета*-амилкоричный спирт, Amylcinnamic alcohol (Arc. 148, RIFM, GIV, IFF), Buxinol (GIV). $C_{14}H_{20}O$; 204,31

С. А. 101-85 9

Запах — слабый, восков жасмина, стойкий.

Жидкость, т. кип. 150°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	95 (ацетил.)	0,954–0,962	25/25	1,533–1,540	>100
IFF, 1992	93 (ГЖХ)	0,942–0,950	20/4	1,512–1,520	>100

Продукт IFF содержит 25–50% амилкоричного спирта и 50–75% его дигидропроизводного.

Амилкоричный спирт может быть получен восстановлением амилкоричного альдегида по Мейервейну—Понндорфу—Верлею.

Используется как компонент парфюмерных композиций, а также в пищевых ароматических эссенциях.

Ограничений IFRA нет.

6.22. Триизопропилбензиловый спирт

2,4,5-Триизопропилбензиловый спирт $C_{16}H_{26}O$; 234,39

Запах — слабый мускусный.

Кристаллы, т. пл. 78°C, $P_{20}3,2 \cdot 10^{-4}$ гПа. Продажный продукт РФ содержит не менее 97% спиртов (ацетил.) и имеет т. пл. 60°C, т. всп. 132°C.

Способ синтеза (В. М. Роднонов, В. Н. Белов, С. А. Корэ, Труды ВНИИСНДВ, вып. 1, 1952, с. 27) включает алкилирование изопропилбензола с получением преимущественно 1,2,4-триизопропнлбензола; последующее хлорметилирование; превращение хлорпронзводного в ацетат и омыление последнего до спирта.

Многостадийность этого способа синтеза и обилие сточных вод препятствуют крупномасштабному производству.

6.23. Диметилбензилкарбинол

2-Метил-3-фенилпропан-2-ол, Dimethyl benzyl carbinol (Arc. 989, RIFM, GIV, IFF, H.+R.). $C_{10}H_{14}O$; 150,22

C. A. 100-86-7

Запах — цветочный, с оттенком запаха сирени и травянисто-древесной нотой. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. заст. 23–24°C, т. кип. 214–216°C/1013 гПа, 86°C/9 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,35 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Т. заст., °C
GIV, 1961	—	0,971–0,977	25/25	1,514–1,518	92	⩾23
GIV, 1984	97	—	—	—	82	⩾23
IFF, 1992	97	0,972–9,980	20/4	1,512–1,517	94	⩾22
H.+R., 1988	98	0,972–0,975	25/25	1,514–1,517	92	⩾23

Традиционный способ производства — синтез по Гриньяру из бензилмагнийхлорида и ацетона.

В парфюмерии используется в сравнительно небольших количествах. Ввод в композиции обычно ие превышает 10%. Ограничений IFRA нет.

6.24. Изобутилбензилкарбинол

Бензилизобутилкарбинол, 4-метил-1-фенил-2-пентанол, Isobutyl benzyl carbinol (Arc. 407, IFF). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

C. A. 7779-78-4

Запах — свежий, цветочно-травянистый Жидкость, т кип 250°C/1013 гПа

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) названного карбинола и имеет d_4^{20}0,941 – 0,949; n_D^{20} 1,501–1,506; т. всп. >100°C.

Может быть получен по реакции Гриньяра из фенилацетальдегида и изобутилмагнийбромида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.25. Диметил-(4-метилбензил)-карбинол

2-Метил-3-(4-метилфенил)-пропан-2-ол, *para*-Methyl dimethylbenzylcarbinol (Arc. 2003, IFF). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

C. A. 20834-59-7

Запах — цветочный, немного бальзамический, приятный, стойкий. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного карбинола и имеет d_4^{20}0,955 – 1,963; n_D^{20} 1,510–1,516; т. всп. >100°C.

Может быть получен по реакции Гриньяра из *пара*-метилбензилмагнийхлорида и ацетона.

Используется в небольших количествах, главным образом в цветочных парфюмерных композициях при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.26. Диметилфенилэтилкарбинол

2-Метил-4-фенилбутан-2-ол, Dimethyl phenylethyl carbinol (Arc. 1043, GIV, IFF, BASF), Centifol. $C_{11}H_{16}O$; 164,25

C. A. 103-05-9

Запах — цветочный, подобный запаху лилии, оттенки травы, зелени. Вязкая жидкость, т. кип. 230°C/1013 гПа; 124–125°C/19 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,2 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Т. заст., °C
GIV, 1986	98	0,959–0,963	20/4	1,508–1,512	81	≥28
IFF, 1992	97	0,958–0,966	20/4	1,508–1,513	>100	26
BASF, 1987	98	0,955–0,965	25/25	1,510–1,513	116	

Может быть получен по реакции Гриньяра из бензилацетона и метилмагнийгалогенида.

Используется чаще всего в цветочных парфюмерных композициях в количестве до 30%. Ограничений IFRA нет.

6.27. Метилфенилэтилэтилкарбинол

3-Метил-1-фенилпентан-3-ол, Phenylethyl methyl ethyl carbinol (Arc. 2541, IFF). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

C. A. 10415-87-9

Запах — мягкий цветочный, ноты нарцисса, сирени, розы.

Жидкость, т. кип. 129–130 °C/17 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческий продукт IFF (1992) имеет чистоту ≥97% (ГЖХ), d_4^{20} 0,957–0,965; n_D^{20} 1,508–1,513; т. всп. >100 °C.

Может быть получен по реакции Гриньяра из бензилацетона и этилмагнийгалогенида.

Используется главным образом в цветочных парфюмерных композициях при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.28. Бензилметиловый эфир

Метилбензиловый эфир, Methyl benzyl ether (Arc. 1919), Benzyl methyl ether (GIV). $C_8H_{10}O$; 1?2,17

C. A. 538-86-3

Содержится в небольшом количестве в розовом ЭМ.

Запах — своеобразный, резкий, цветочный. Жидкость, т. кип. 171 °C/1013 гПа.

Продукт, вырабатываемый GIV (1987), содержит не менее 98% (ГЖХ) бензилметилового эфира и имеет d_4^{20} 0,959–0,966; n_D^{20} 1,498–1,505; т. всп. 53 °С.

Один из способов промышленного получения — взаимодействие хлористого бензила с метилатом натрия.

Используется главным образом в отдушках для мыла, товаров бытовой химии и в промышленных дезодорантах. Ограничений IFRA нет.

6.29. Бензилизоамиловый эфир

Изоамилбензиловый эфир, iso-Amyl benzyl ether (Arc. 135), Benzyl isoamyl ether (GIV). $C_{12}H_{18}O$; 178,27

С. А. 122-73-6

Запах — грубый, фруктовый, при разбавлении — цветов гардении. Жидкость, т. кип. 255 °С/1013 гПа; 117–119 °С/25 гПа.

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт имеет d_{25}^{25} 0,904–0,910; n_D^{20} 1,481–1,485; т. всп. 93 °С.

Получают взаимодействием изоамилового спирта с хлористым бензилом при нагревании с избытком щелочи.

Прежде использовался в больших количествах в отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

6.30. Фенилэтилметиловый эфир

2-Фенилэтилметиловый эфир, метилфенилэтиловый эфир, Methyl phenylethyl ether (Arc. 2192, IFF), Phenylethylmethylether (BASF), Pandanol (GIV). $C_9H_{12}O$; 136,20

OCH$_3$

С. А. 3558-60-9

Содержится в ЭМ *Pandanus odoratissimus* и некоторых других.

Запах — резкий цветочный, при разбавлении возникают ноты запаха жасмина — туберозы. Жидкость, т. кип. 186–192 °С/1013 гПа, 100–104 °С/33 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 4,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 4,0 (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1986	98	0,947–0,951	1,497–1,501	66
BASF, 1988	99,5	0,945–0,952	1,496–1,502	73
IFF, 1992	97	0,945–0,953	1,496–1,501	66

Получают взаимодействием фенилэтилового спирта и метанола с концентрированной серной кислотой или каталитическим гидрированием диметилацеталя фенилацетальдегида.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.31. Фенилэтилэтиловый эфир

2-Фенилэтилэтиловый эфир, этилфенилэтиловый эфир, Ethyl phenylethyl ether (Arc. 1338), Rosacynthin (H.+R.). $C_{10}H_{14}O$; 150,22

С. А. 1817-90-9

Запах — сильный, цветов и зелени, оттенки запаха розы, гиацинта. Продажный продукт H.+R. (1988) представляет собой жидкость, содержащую не менее 98% названного эфира. Он имеет d_{25}^{25} 0,925–0,934; n_D^{20} 1,490–1,495; т. всп. 77°С.

Один из способов получения состоит в каталитическом гидрировании диэтилацеталя фенилацетальдегида.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.32. Фенилэтилизопропиловый эфир

2-Фенилэтилизопропиловый эфир, изопропилфенилэтиловый эфир, Phenylethyl isopropyl ether, Petiole (Quest). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

С. А. 68039-47-4

Запах — интенсивный, напоминает запах листьев настурции. Жидкость, т. кип. 90 °С/6,7 гПа.

Продажный продукт Quest (1989) содержит, по данным ГЖХ, не менее 75% названного эфира и не более 20% фенилэтилового спирта. Он имеет d_{20}^{20} ~0,925; n_D^{20} ~1,490; т. всп. 76°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.33. Фенилэтилбутиловый эфир

2-Фенилэтилбутиловый эфир, бутилфенилэтиловый эфир, Phenylethyl n-butyl ether (Quest).

$C_{12}H_{18}O$; 178,27

C. A. 5331-14-6

Запах — освежающий, пряный, свежей зелени. Продукт, вырабатываемый Quest (1989), представляет собой жидкость, имеющую d_{20}^{20} 0,910–0,913; n_D^{20} 1,485–1,488; т. всп. 99 °С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в дозах до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.34. Фенилэтилизоамиловый эфир

2-Фенилэтилизоамиловый эфир, изоамилфенилэтиловый эфир, iso-Amyl phenylethyl ether (Arc. 210), Treflone (TAK), Anther (Quest).

$C_{13}H_{20}O$; 192,30

C. A. 56011-02-0

Запах — сильный, цветочный, с нотами розы, гиацинта. Жидкость, т. кип. 109–110 °С/10,6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
TAK, 1987	98	0,895–0,915	1,477–1,485	108
Quest, 1989	96	0,899–0,902	1,481–1,482	>100

Один из традиционных методов получения состоит во взаимодействии смеси фенилэтилового и изоамилового спиртов с концентрированной серной кислотой.

Используется в производстве парфюмерных композиций и отдушек. Дозировка обычно не превышает 1 %. Ограничений IFRA нет.

6.35. Фенилэтилаллиловый эфир

2-Фенилэтилаллиловый эфир, аллилфенилэтиловый эфир, Mycolide (Roure).

$C_{11}H_{14}O$; 162,23

Запах — сильный, острый, свежей зелени, с оттенками запаха меда, грибов.

Продажный продукт Roure (1990) содержит не менее 99% (ГЖХ) эфира и имеет d_{20}^{20} 0,945–0,949; n_D^{20} 1,502–1,506, т. всп. 97 °С.

Острая токсичность по данным Roure: oral LD_{50} >2 г/кг.

Один из методов получения состоит во взаимодействии алкоголята фенилэтилового спирта с хлористым аллилом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла. В соответствии с рекомендацией IFRA массовая доля аллилового спирта в товарном продукте не должна превышать 0,1 %.

6.36. Фенилэтилпрениловый эфир

2-Фенилэтилпрениловый эфир, пренилфенилэтиловый эфир, Jacene (Roure).

$C_{13}H_{18}O$; 180,28

Запах — свежий, цветов и зелени, ноты сирени, гиацинта. Жидкость.

Острая токсичность по данным Roure: oral LD_{50} 4–8 г/кг.

Продажный продукт Roure (1990) содержит не менее 98% эфира и имеет d_{20}^{20} 0,934–0,938; n_D^{20} 1,504–1,508; т. всп. 120 °С.

Один из методов получения состоит во взаимодействии алкоголята фенилэтилового спирта с пренилхлоридом (Ehret Ch., швейц. пат. 617851, 8.12.76–30.06.80, РЖХ, 1981, 5Р484П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.37. Фенилэтилциклогексиловый эфир

2-Фенилэтилциклогексиловый эфир, циклогексилфенилэтиловый эфир, Phenylethyl cyclohexyl ether, Phenafleur (IFF).

$C_{14}H_{20}O$; 204,31

C. A. 80858-47-5

Запах — цветочный, нота гиацинта, с оттенком запаха малины. Продажный продукт IFF (1992) представляет собой жидкость, которая содержит не менее 97% (ГЖХ) эфира и имеет d_4^{20} 0,967–0,975; n_D^{20} 1,508–1,513; т. всп. >100°C.

Острая токсичность по данным IFF: oral LD_{50} >5 г/кг (крысы).

Может быть получен взаимодействием фенилэтилового спирта, циклогексанола и серной кислоты (Kiwala J. и др., пат. США 4337180, 28.05.81–29.06.82, РЖХ, 1983, 6Р668П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного иазначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.38–6.70. АЛЬДЕГИДЫ

6.38. Бензальдегид

Бензойный альдегид, Benzaldehyde (Arc. 268, RIFM, GIV, H.+R., Quest).

C_7H_6O; 106,13

C. A. 100-52-7

Содержится в масле горького миндаля и в ЭМ иланг-иланга, эвкалипта и др.

Запах — сильный, свежеизмельченного миндаля. Жидкость, т. кип. 178 °C/1013 гПа; 63 °C/13 гПа; 45 °C/6,7 гПа; γ_{20} 41,9 дин/см; σ_{20} 1,9 спуаз; P_{30} 1,5 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 2,85 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 1,25 г/кг (кролики).

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	N.F.	98	1,041–1,046	25/25	1,544-1,547	64
H.+R., 1988	FfC	98	1,041–1,046	25/25	1,544-1,546	64
Quest, 1989	FCC	—	1,041–1,046–	25/25	~1,544	63
BBA, 1990	Spec. pure	98	1,043–1,049	20/20	1,544-1,546	64
РФ, 1990	Высшей очистки	99	1,043–1,048	20/4	1,542-1,545	64

Получают гидролизом бензальхлорида с последующей тщательной очисткой от хлорсодержащих органических соединенний. Может быть также получен каталитическим окислением толуола воздухом.

Используется в пищевых ароматических эссенциях и в некоторых парфюмериых композициях. В значительных количествах используется для сиитеза других душистых веществ. Ограиичений IFRA нет.

6.39. Фенилацетальдегид

Фенилуксусный альдегид, Phenylacetaldehyde (Arc. 2470, RIFM, GIV, H.+R., BASF).

C_8H_8O; 120,15

C. A. 122-78-1

Содержится в ЭМ цитрусовых, розы и др.

Запах — сильный, острый, зелени, гиацинта. Жидкость, склонная к полимеризации, т. кип. 200 °C/1013 гПа; 85–86 °C/13 гПа; P_{20} 0,36 гПа; γ_{20} 41,5 дин/см; σ_{20} 2,1 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3,89 (крысы, мыши, морские свинки), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Состав, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1987	РАА 85%	ФАА 80–90	1,041–1,051	1,530–1,540	68
BASF, 1987	РАА 50	ФАА>50 ФЭС<50	1,0080–1,0084	1,557–1,560	90
H.+R., 1988	PAA 100%	ФАА⩾95	1,023–1,035	1,524–1,532	68
H.+R., 1988	PAA 50% in PEA	ФАА>49 ФЭС<51	1,055–1,060	1,543–1,547	92
H.+R., 1988	PAA 85% in PEA	ФАА⩾85	1,038–1,044	1,532–1,537	88
H.+R., 1988	PAA 50% in DEP	ФАА>49 ДЭФ<51	1,064–1,070	1,511–1,518	68
РФ, 1990	—	ФАА⩾91	1,035–1,046	1,528–1,532	81

Промышленные методы получения основаны на процессах каталитического окисления или дегидрирования фенилэтилового спирта; термической или каталитической изомеризации оксида стирола.

Заполимеризованный продукт может быть частично регенерирован перегонкой над кислым катализатором.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. IFRA (1975) рекомендует применять фенилэтилацетальдегид в парфюмерных композициях только при одновременном введении равных количеств фенилэтилового спирта или дипропиленгликоля.

6.40. 4-Метилбензальдегид

пара-Метилбензальдегид, *para*-Tolylaldehyde (Arc. 2962), Tolualdehyde (RIFM), Tolyl aldehyde (GIV), p-Tolylaldehyd R (BASF).

C_8H_8O; 120,15

CHO

C. A. 104–87–0

Найден в некоторых пищевых продуктах: рисе, томатах, пиве и др.

Запах — мягкий цветочный, миндальный.

Жидкость, т. кип. 204°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 2,25 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 2,5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	95	1,013–1,016	1,543–1,547	71	Смесь изомеров
BASF, 1987	99	1,008–1,011	1,545–1,548	71,5	

Может быть получен из толуола хлорметилированием и последующим превращением хлорметильного производного в альдегид по реакции Соммле, а также карбонилированием по Гаттерману—Коху.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.41. 4-Метилфенилацетальдегид

пара-Метилфенилацетальдегид, *para*-Tolyl acetaldehyde (Arc. 2954, RIFM, GIV), Syringa aldehyde (GIV).

$C_9H_{10}O$; 134,18

CHO

C. A. 104–09–6

Запах — сильный, зелени и фруктов, приятный. Жидкость, т. кип. 221–222°С/1013 гПа; d_4^{20} 1,005; n_D^{20} 1,526.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1987), выпускаемый под названием "Syringa aldehyde", содержит 48–55% (ГЖХ) названного альдегида в смеси с фенилэтиловым и 4-метилфенилэтиловым спиртом и имеет d_4^{20} 1,030–1,035; n_D^{20} 1,536–1,542; т. всп. 70°С.

Может быть получен из 4-метилбензальдегида взаимодействием с этиловым эфиром хлоруксусной кислоты, гидролизом и декарбоксилированием образовавшегося глицидата.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.42. Фенилпропионовый альдегид

3-Фенилпропаналь, гидрокоричный альдегид, 3-Phenylpropionic aldehyde (Arc. 2580), Phenyl propyl aldehyde (RIFM, GIV, IFF), Phenylpropionaldehyde (H.+R.), 3-Phenylpropanal (Hüls). $C_9H_{10}O$; 134,18

CHO

C. A. 104-53-0

Содержится в коричном и других ЭМ.

Запах — сильный, бальзамический, цветочный типа гиацинта. Жидкость, т. кип. 221–224°C/985 гПа; 112°C/27 гПа; 104–105°C/17 гПа; P_{20} $4,2 \cdot 10^{-2}$ гПа, γ_{20} 37,9 дин/см, σ_{20} 6,5 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	93	1,011–1,015	25/25	1,521–1,526	97
H.+R., 1988	98	1,010–1,015	25/25	1,520–1,524	> 100
Hüls, 1990	98	~ 1,012	20/4	—	114
IFF, 1992	95	1,007–1,015	25/25	1,519–1,523	> 100

Может быть получен селективным каталитическим гидрированием коричного альдегида или одностадийной изомеризацией коричного спирта на специальных катализаторах.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.43. Гидратроповый альдегид

2-Фенилпропаналь, *альфа*-фенилпропионовый альдегид, Hydratropaldehyde (Arc. 1696, BASF), Hydratropic aldehyde (RIFM, GIV, IFF), 2-Phenylpropanal (Hüls). $C_9H_{10}O$; 134,18

CHO

C. A. 93-53-8

Запах зелени, подобный запаху гиацинта. Жидкость, т. кип. 221–224°C/1013 гПа; 101–102°C/29 гПа; 93°C/14,6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,65 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	85	1,001–1,008	20/4	1,515–1,520	77
IFF, 1992	95	1,003–1,011	20/4	1,515–1,520	77
BASF, 1987	98,5	0,998–1,015	25/25	1,515–1,525	80
Hüls, 1990	98	~ 1,002	20/4	—	79

Может быть получен изомеризацией оксида *альфа*-метилстирола. Прежде его получали по Дарзану путем взаимодействия ацетофенона с этиловым эфиром хлоруксусной кислоты, гидролиза и декарбоксилирования образовавшегося глицидного эфира.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.44. Коричный альдегид

3-Фенил-2-пропеналь, Cinnamic aldehydė (Arc. 619, RIFM, GIV, Quest), Cinnamaldehyde (H.+R., BBA), Zimtaldehyd. C_9H_8O; 132,16

CHO

C. A. 104-55-2

Содержится в ЭМ корицы, а также в пачулиевом, розовом и других ЭМ.

Запах — пряный, бальзамический, напоминает запах корицы, мимозы. Жидкость, т. кип. 128–130°С/27 гПа; 118–120°С/13,3 гПа; P_{20} 1,66 10^{-2} гПа; γ_{20} 44,4 дин/см; σ_{20} 5,8 спуаз; *транс*-изомер: т. кип. 80°С/0,53 гПа; d_4^{20} 1,050; n_D^{20} 1,6195; *цис*-изомер: т. кип. 69°С/0,53 гПа; d_4^{20} 1,044; n_D^{20} 1,5937.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3,35 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 0,6 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	1,046–1,050	25/25	1,619–1,623	128	
H.+R., 1988	98	1,047–1,050	25/25	1,619–1,623	138	Cl отсутствует
Quest, 1989	—	1,046–1,050	20/20	1,620–1,623	> 100	
BBA, 1990	98	1,047–1,052	20/20	1,619–1,622	111	Сорт PQ
РФ, 1990	99	~ 1,052	20/4	1,620–1,622	—	

Промышленный метод получения коричного альдегида состоит в конденсации бензальдегида с ацетальдегидом при катализе водным раствором щелочи. Из-за возможных побочных процессов требуется тщательный подбор условий реакции. (Л. К. Андреева и др., Масложировая пром-сть, 1986, № 11, с. 27).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 4%. IFRA рекомендует использовать совместно с эвгенолом или лимоненом.

6.45. 3-Фенилбутаналь

бета-Метилгидрокоричный альдегид, Trifernal (Firm.). $C_{10}H_{12}O$; 148,21

C. A. 16251-77-7

Запах — сильный, стойкий, зеленых листьев. Жидкость, т. кип. 70°С/1,3 гПа.

Острая токсичность по данным Firm. (1989): oral LD_{50} 2,7 г/кг.

Продажный продукт Firm. содержит не менее 96% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 0,987–1,005; n_D^{20} 1,510–1,520, т. всп. 78°С

Возможный способ промышленного получения — гидроформилирование *альфа*-метилстирола (Bernhagen W. и др., заявка ФРГ 3141301, 17.10.81–28.04.83; РЖХ, 1984, 3Р608П).

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.46. Френаль

пара-Метилгидрокоричный альдегид, 3-(4-метилфенил)-пропаналь, *para*-Methyl hydrocinnamic aldehyde (Arc. 2073). $C_{10}H_{12}O$; 148,21

Запах — свежий, напоминает запах арбуза. Жидкость, т. кип. 80°С/1,3 гПа; $d_4^{20} \sim 1,000$; $n_D^{20} \sim 1,520$.

В соответствии со спецификацией РФ (1990) продажный продукт содержит не менее 85% альдегида (оксим.). Может быть получен конденсацией толуола с диацетатом акролеина при катализе $TiCl_4$ (Skriabine I., Bull. Soc. Chim. Fr., 1961, c. 1194) или $SnCl_4$ (Н. Е. Колоrривова и др., авт. свид. 250120, 3.06.68–12.08.69).

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках для синтетических моющих средств и товаров бытовой химии. IFRA (1987) установила, что концентрация френаля в парфюмерных композициях и отдушках не должна превышать 1%.

6.47. Жасморанг

2-Метил-3-(4-метилфенил)-пропаналь, *пара*, *альфа*-диметилгидрокоричный альдегид, 2-Methyl-3-tolyl propionaldehyde (Arc. 2249), Jasmorange (BASF), Satinaldehyde. $C_{11}H_{14}O$; 162,23

Запах — интенсивный, фруктово-бальзамический, с нотами цветов, зелени. Жидкость, т. кип. 85–87°С/1 гПа.

Продажный продукт BASF (1987) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{25}^{25} 0,963–0,967; n_D^{20} 1,510–1,513; т. всп. 86°С.

Промышленный синтез может быть осуществлен двумя способами: конденсацией 4-метилбензальдегида с пропионовым альдегидом в присутствии щелочи и последующим селективным гидрированием образовавшегося ненасыщенного альдегида или присоединением диацетата метакролеина к толуолу по Скрябину (Skriabine I., Bull. Soc. Chim. Fr., 1961, c. 1194).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.48. Цикламенальдегид

2-(4-Изопропилбензил)-пропаналь, Cyclamen aldehyde (Arc. 758, RIFM, GIV). $C_{13}H_{18}O$; 190,28

C. A. 103-95-7

Запах — сильный, цветочный (цикламена), с нотой зелени. Жидкость, т. кип. 141–142°С/13 гПа; 115°С/7 гПа; 108–108,5°С/2,7 гПа; P_{20} $5,5 \cdot 10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,8 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	0,944–0,949	1,503–1,507	75	ГЖХ — сумма изомеров, о-изомер < 5%, сорт экстра.
GIV, 1984	97	0,946–0,952	1,503–1,508	75	ГЖХ — сумма изомеров, о-изомер < 12%.
РФ, 1990	91	~ 0,950	1,507–1,510	105	Определение оксимированием
КНР, 1990	90	0,946–0,952	1,505–1,510	96	

Промышленный синтез осуществляют двумя способами: конденсацией куминового альдегида с пропионовым с последующим селективным гидрированием непредельного альдегида или взаимодействием изопропилбензола с диацетатом метакролеина по способу Скрябина (Bull. Soc. Chim. Fr., 1961, c. 1194).

Используется во многих парфюмерных композициях и отдушках. IFRA запрещает использование цикламенальдегида, который содержит больше 1,5% соответствующего спирта.

6.49. Лилиальдегид

2-(4-Трет. бутилбензил)-пропаналь, *пара*-трет. бутил-*альфа*-метилгидрокоричный альдегид, *para*-tert. Butyl-*alpha*-methyl hydrocinnamic aldehyde (Arc. 496, RIFM), Lilial (GIV), Lilestralis (BBA), Lismeral (BASF). $C_{14}H_{20}O$; 204,31

C. A. 80-54-6

Запах — свежий, цветочный (ландыша, лилии, цикламена). Жидкость, т. кип. 279°С/1013 гПа; 126–127°С/8 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral. LD_{50} 3,7 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	95	0,941–0,946	25/25	1,503–1,507	> 100	
BBA, 1990	96	~ 0,943	20/20	~ 1,505	> 100	п-изомер ⩾90%
BASF, 1987	95	0,942–0,944	25/25	1,504–1,505	118	
РФ, 1990	80	~ 0,945	20/4	1,508–1,512	—	
КНР, 1990	91	—	—	—	99	

Впервые получен В. М. Родионовым и др. в 1952 г. (Труды ВНИИСНДВ, вып. II, 1954 г., с. 19). Промышленное производство начато GIV по патенту США 2875131, 11.06.56–24.02.59 (авторы Garpenter M. S.,

Easter W. M.). Синтез осуществляют по типу синтеза цикламенальдегида. Возможно получение лилиальальдегида алкилированием *альфа*-метилгидрокоричного спирта изобутиленом при последующем дегидрировании полученного спирта до альдегида (Webb D., англ. заявка 2079751, 8.07.81–27.01.82, РЖХ, 1982, 21Р471П).

Используют во многих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.50. *пара*-Трет. бутилгидрокоричный альдегид

3-(4-Трет.бутилфенил)-пропаналь, p-tert. Butyldihydrocinnamaldehyde (RIFM), Burgeonal (Naarden-Quest). $C_{13}H_{18}O$; 190.28

C. A. 18127-01-0

Запах— сильный, цветочный (цикламена, ландыша). Жидкость, т. кип. 110–112°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} 2,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного альдегида и имеет d_{20}^{20} 0,959–0,965; n_D^{20} 1,508–1,512; т. всп. 135°С.

Промышленное получение возможно взаимодействием трет.-бутилбензола с диацетатом акролеина по Скрябину (Bull. Soc. Chim. Fr., 1961, p. 1194).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. В соответствии с рекомендацией IFRA (1991) максимальный ввод в композиции и отдушки 3%.

6.51. Куминовый альдегид

4-Изопропилбензальдегид, Cuminaldehyde (Arc. 753, RIFM), Cuminic aldehyde (GIV). $C_{10}H_{12}O$; 148,21

C. A. 122-03-2

Содержится в куминовом, эвкалиптовом и других ЭМ.

Запах — резкий, неприятный, травы, зелени. Жидкость, т. кип. 235,5°С/1013 гПа, 109,5°С/18 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,4 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,8 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1987) содержит не менее 98% (ГЖХ) изомерных альдегидов (*пара*-изомер >87%) и имеет d_4^{20} 0,977–0,981; n_D^{20} 1,528–1,533; т. всп. 93°С.

Может быть получен хлорметилированием изопропилбензола и превращением куминилхлорида в альдегид по реакции Соммле.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в микродозах (не более 1%). Ограничений IFRA нет. Является исходным сырьем для синтеза цикламенальдегида.

6.52. Флоралозон

2,2-Диметил-3-(4-этилфенил)-пропаналь, *пара*-этил-*альфа*-, *альфа*-диметил-гидрокоричный альдегид, *para*-Ethyl-*alpha*, *alpha*-dimethyl hydrocinnamic aldehyde (Arc. 1211), α, α-Dimethyl-p-ethylphenyl-propanal (RIFM), Floralozone (IFF), Florazone (Dragoco). $C_{13}H_{18}O$; 190,28

C. A. 6734-14-4

Запах — свежий, цветочный (цикламена), ноты озона, морского бриза. Жидкость, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
IFF, 1992	94	0,951–0,959	1,504–1,509	>100	П-60–80% О-15–35% М-<5%
Dragoco, 1990	94	0,950–0,960	1,504–1,510	75	

Может быть получен алкилированием изомасляного альдегида *пара*-этилбензилхлоридом в условиях катализа фазового переноса.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.53. Метилцикламенальдегид

2,2-Диметил 3-(4-изопропилфенил)-пропаналь, *пара*-изопропил-*альфа*, *альфа*-диметилгидрокоричный альдегид, Methyl cyclamen aldehyde (РФ) — $C_{14}H_{20}O$; 204.31

Запах — свежий, озона, цветочный (цикламена). Жидкость, т. кип. 116–118°С 6,7 гПа; d_4^{20} ~0,957; n_D^{20} ~1,503.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral LD_{50} 3,2 г/кг.

Получают алкилированием изомасляного альдегида куминилхлоридом в условиях катализа фазового переноса (Войткевич С. А. и др., авт. свид. 1047122, 1.10.81–7.02.92, БИ, 1992, № 5).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

6.54. *пара*-Метилгидратроповый альдегид

2-*пара*-Толилпропаналь, *para*-Methylhydratropic aldehyde (Arc. 2070, GIV), p-Methyl hydratropaldehyde (RIFM). — $C_{10}H_{12}O$; 148,21

С. А. 99–72–9

Запах — сильный, приятный, свежей зелени. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 3,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 95% альдегида (оксим.) и имеет d_{25}^{25} 0,979–0,985; n_D^{20} 1,514–1,516; т. всп. 88°С.

Традиционный метод получения состоит во взаимодействии *пара*-метилацетофенона с эфиром хлоруксусной кислоты по Дарзану и в последующем омылении и декарбоксилировании глицидного эфира.

Рекомендуется использовать в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.55. *пара*-Изопропилгидратроповый альдегид

2-(4-Изопропилфенил)-пропаналь, *para*-Isopropyl hydratropic aldehyde (Arc. 2717, IFF). — $C_{12}H_{16}O$; 176.26

С. А. 34291–99–1

Запах — сильный, зеленых листьев с древесной нотой. Жидкость, смесь изомеров.

Продажный продукт IFF (1992) содержит ~85% (ГЖХ) суммы изомерных альдегидов и имеет d_4^{20} 0,965–0,973; n_D^{20} 1,513–1,518; т. всп. > 100°С.

Может быть получен из изопропилацетофенона по реакции Дарзана.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.56. Метилфенилпентаналь

3-Метил-5-фенилпентаналь, Mefranal (Quest). — $C_{12}H_{16}O$; 176,26

С. А. 55066–49–4

Запах — стойкий, альдегидный, зелени, напоминает запах ландыша. Жидкость, т. кип. 254°С/1013 гПа.

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 94% названного альдегида и имеет d_{20}^{20} ~0,966; n_D^{20} ~1,506; т. всп.>100°С.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 0,5–2%. Ограничений IFRA нет.

6.57. *альфа*-Метилкоричный альдегид

2-Бензилиденпропаналь, 2-метил-3-фенилпропеналь, *alpha*-Methyl cinnamic aldehyde (Arc. 1951, RIFM, IFF, GIV, BBA), *alpha*-Methylcinnamaldehyde (H.+R.) — $C_{10}H_{10}O$; 146,19



С. А. 101–39–3

Запах — пряный, бальзамический, корицы, с цветочным оттенком. Жидкость, т. кип. 95–100°С/4 гПа; P_{20} $1{,}01 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,05 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5,0 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	95	1,035–1,039	25/25	1,603–1,607	98
H.+R., 1988	98	1,035–1,038	25/25	1,603–1,606	>100
BBA, 1990	97	1,036–1,040	20/20	1,604–1,607	98
EOA	97	1,035–1,039	25/25	1,603–1,607	99
IFF, 1992	95	1,032–1,040	25/25	1,602–1,607	>100

Получают конденсацией бензальдегида с пропионовым альдегидом при катализе щелочью.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.58. Жасминальдегид

альфа-Амилкоричный альдегид, 2-бензилиденгептаналь, Amyl cinnamic aldehyde (Arc. 149, RIFM, GIV, IFF, BBA, Firm.), *alpha*-Amylcinnamaldehyde (H.+R.), Buxine (GIV), Jasmonal (IFF), Jaminal (BBA).

$C_{14}H_{18}O$; 202,29

С. А. 122-40-7

Запах — сильный цветочный, напоминает запах жасмина. Жидкость, т. кип. 153–154°C/13 гПа; 148°C/7 гПа; P_{20} $1{,}01 \cdot 10^{-3}$ гПа; γ_{20} 44,2 дин/см; σ_{20} 9,2 спуаз; смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 2 г/кг (кролики). По данным IFF (1992): derm. LD_{50} 7,2 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Сорт	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1987	—	97	0,964–0,969	20/4	1,554–1,559	>100
H.+R., 1988	—	98	0,966–0,968	25/25	1,556–1,559	156
IFF, 1992	Coeur	95	0,964–0,972	20/4	1,555–1,559	>100
BBA, 1990	—	97	0,965–0,970	20/20	1,554–1,558	146
BBA, 1990	Jaminal	~99	~0,967	20/20	~1,558	146
РФ, 1990	В. сорт	97,5	0,964–0,970	20/4	1,552–1,555	139
Firm., 1992	—	—	0,965–0,970	20/20	1,554–1,559	>100

Продолжение табл.

Получают конденсацией бензальдегида с гептаналем при катализе щелочью.

Широко используется при производстве парфюмерных композиций и отдушек различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.59. Гексилкоричный альдегид

альфа-Гексилкоричный альдегид, 2-бензилиденоктаналь, Hexyl cinnamic aldehyde (Arc. 1653, RIFM, GIV, IFF, BBA), Jasmonal H (IFF), Vert de jasmin (Dragoco).

$C_{15}H_{20}O$; 216,33

С. А. 101-86-0

Запах — стойкий, цветочный, напоминает запах жасмина, гардении. Жидкость, т. кип. 174–176°C/20 гПа, 140–141,5°C/4 гПа, смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	98	0,954–0,960	20/4	1,548–1,552	>100
IFF, 1990	95	0,952–0,950	20/4	1,547–1,552	>100

Продолжение табл.

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
BBA, 1990	95	0,950–0,957	20/20	1,547–1,551	>100
Dragoco	—	0,952–0,962	20/4	1,542–1,552	>100
Firm, 1992	—	0,955–0,965	20/20	1,548–1,552	>100

Получают конденсацией бензальдегида с октаналем при катализе щелочью.

Используется во многих парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

6.60 Салициловый альдегид

2-Гидроксибензальдегид, Salicylic aldehyde (Arc. 2815), Salicylaldehyde (RIFM, R.-P.). $C_7H_6O_2$; 122,13

CHO
OH

С. А. 90-02-8

Содержится в ЭМ *Cinnamomum cassia, Tagetes minuta* и др., а также в табачных листьях.

Запах — резкий, миндальный, с нотой фенола, при сильном разведении — травянистый, пряно-цветочный. Жидкость, т. кип. 197°С/1013 гПа, 93°С/33 гПа, γ_{20} 43,4 дин/см, σ_{20} 2,7 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 0,52 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,0 г/кг (кролики).

Продажный продукт R.-P. (1988) содержит не менее 99% салицилового альдегида и имеет d_{20}^{20} 1,160–1,170; n_D^{20} ~1,574; т. всп. 79°С.

Получают из фенола и хлороформа по реакции Раймера-Тимана с последующим разделением смеси фенол — салициловый альдегид.

В парфюмерных композициях и отдушках используют редко, причем в микродозах. Главное назначение — синтез кумарина. Используют также в некоторых пищевых ароматических эссенциях.

6.61. Ванилин

4-Гидрокси-3-метоксибензальдегид, Vanillin (Arc. 3067, RIFM, H.+R., BBA, R.-P.). $C_8H_8O_3$; 152,15

CHO
HO
OCH3

С. А. 121-33-5

Содержится в стручках ванили, а также в перуанском и толуанском бальзамах и в бензойной смоле.

Запах — сильный, характерный, ванили. Кристаллическое вещество, т. пл. 82,3–82,8°С; т. кип. 170°С/20 гПа; 154°С/13 гПа; P_{20} $1{,}58 \cdot 10^{-4}$ гПа.

Растворимость в воде при 20°С 10 г/л.

Острая токсичность по RIFM: oral LD_{50} 2–2,8 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С
H.+R., 1988	99	81	147
BBA, 1990	98	81–83	162
РФ, 1990	99	80,5–82	162
R.-P.,. 1988	99	81	153

Из многочисленных методов промышленного получения ванилина (см. С. А. Войткевич, Е. Д. Ласкина, Жури. ВХО им. Менделеева, 1960, 5, № 4, с. 386) наиболее перспективным является "глиоксиловый метод" синтеза из гваякола, осуществленный в крупном масштабе на предприятиях R.-P. Промышленный озонолиз диметилового эфира малеиновой кислоты (Saitos A. и др., заявка ФРГ 3224795, 2.07.82–1.01.84, РЖХ, 1984, 24Н46П) позволил получать с хорошим выходом концентрированные растворы глиоксиловой кислоты. Конденсация глиоксиловой кислоты с гваяколом в щелочной среде приводит к получению натровой соли 4-гидрокси-3-метоксифенилгликолевой кислоты, окислительное расщепление которой дает ванилин.

Из многих вариантов такого окислительного расщеплеия наиболее прост метод окисления воздухом в колонном аппарате непрерывного действия (Р. Ю. Шагалова и др., Труды ВНИИСНДВ, вып. IV, 1958, с. 34).

Производство ванилина из лигнинсодержащих материалов утрачивает свое прежнее значенне из-за трудиостей экологического характера.

Ванилин используется во многих парфюмериых композициях и отдушках. Однако главная область его применения — ароматизация шоколада, кондитерскнх изделий, мороженого, бисквнтов и т. п. На это ежегодно расходуется несколько тысяч тони ванилина. Ограничений IFRA нет.

6.62. Ванилаль

4-Гидрокси-3-этоксибензальдегид, Арованилон, Ethyl vanillin (Arc. 1363, RIFM, GIV, BBA, H.+R.), Bourbonal (H.+R.), Rhodiarome (R.-P.). $C_9H_{10}O_3$; 166, 18

С. А. 121-32-4

Запах — подобный запаху ванили, с цветочиым оттенком, интенсивный. Кристаллическое вещество, т. пл. 77,5-78°С, P_{20} 1,02 · 10^{-4} гПа, т. кип. 171°С/23 гПа, 145°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >2 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Т. пл., °С	Т. всп., °С
H.+R., 1988	99	⩾76	145
BBA, 1990	99	76-78	>110
R.-P., 1986	99	77-79	127

Получают из гуэтола способами, аналогичными синтезу ванилина В последнее время предпочтение отдано "глиоксиловому методу".

Используется во многих парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. При использовании в кондитерских изделиях принято считать, что интенсивность запаха и вкуса ванилаля превосходит эффективность ванилина в два раза Ограничений IFRA нет.

6.63. Вератровый альдегид

3,4- Диметоксибензальдегид, Veratraldehyde (Arc. 3077, RIFM, BBA, R.-P.). $C_9H_{10}O_3$; 166,18

С. А. 120-14-9

Содержится в небольшом количестве в ЭМ *Cymbopogon javanensis* и др.

Запах — приятный, древесный, с нотами ванили, гелиотропа, стойкий. Кристаллическая масса, т. пл. 44,5-45°С; т. кип. 285°С/1013 гПа; 154-155°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,0 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт BBA (1990) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного альдегида и имеет минимальную т. заст. 39°С и т. всп. >100°С. Продукт R.-P. (1988) имеет чистоту 99% (ГЖХ), т. заст. ⩾ 41°С; т. всп. 163°С.

Получают метилированием ванилина.

Используют в сравнительно небольшом числе парфюмерных композиций и мыльных отдушек. Ограничений IFRA нет. Вератровый альдегид применяют также в качестве полупродукта синтеза некоторых лекарств.

6.64. Гелиотропин

3,4-Метилендиоксибензальдегид, пиперональ, Heliotropine (Arc. 1484, RIFM, BBA, GIV, TAK) $C_8H_6O_3$, 150, 14

С. А. 120-57-0

Содержится в сассафрасовом и других ЭМ.

Запах — цветочный, пряный, напоминает запах цветов гелиотропа Кристаллическое вещество, т. пл. 36,7-37,1°С, т. кип. 139°С/16 гПа, 135°С/13 гПа, 112°С/7 гПа, P_{20} 3,7 · 10^{-3} гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,7 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Минимальная т.пл., °C	Т. всп., °C
BBA, 1990	99 (ГЖХ)	35	121
ТАК, 1987	99 (ГЖХ)	35,5–37	131
РФ, 1990	100 (оксим.)	36,5	130

Промышленный метод получения состоит в окислении изосафрола, который получают изомеризацией сафрола, выделяемого из бразильского сассафрасового или китайского ЭМ *Cinnamomum micrantum*. Традиционно окисление осуществляли с использованием хромовой смеси. На предприятиях ТАК окисление ведут озоном.

Используют во многих парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.65 Пиперонилпропаналь

2-Метил-3(3,4-метилендиоксифенил)-пропаналь, пиональ, *alpha*-Methyl-3,4-methylendioxy hydrocinnamic aldehyde (Arc. 2110), Helional (IFF), Aquanal (Quest), Heliofolal (H.+R.), Heliobouquet (TAK).

$C_{11}H_{12}O_3$; 192, 22

CHO
O
O

C. A. 1205–17–0

Запах — мягкий, цветочный (цикламена), свежий, травянистый. Жидкость, т. кип. 125°C/7 гПа, 97–99°C/0,8 гПа.

Острая токсичность по данным IFF (1992): oral LD_{50} 3,6 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т всп., °C
IFF, 1992	96	1,159-1,167	20/4	1,531-1,536	>100
Quest, 1989	98	1,165-1,168	20/4	1,533-1,536	111
H.+R., 1988	98	1,160-1,164	25/25	1,532-1,535	126
ТАК, 1987	97	1,160-1,168	20/20	1,530-1,535	104

Получают конденсацией гелиотропина с пропионовым альдегидом при катализе щелочью и последующим селективным каталитическим гидрированием.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.66. Анисовый альдегид

4-Метоксибензальдегид, обепин, Anisaldehyde (Arc. 241, H.+R., BASF, BBA), Anisic aldehyde (RIFM), Aubepine (GIV).

$C_8H_8O_2$; 136,15

CHO
CH_3O

C. A. 123-11-5

Содержится в анисовом, фенхельном и многих других ЭМ.

Запах — приятный, мимозы, боярышника. Жидкость, т.кип. 248–249°C/1013 гПа; 134–135°C/16 гПа; 91°C/5,3 гПа; P_{20} $2,7 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 44,2 дин/см; σ_{20} 5,2 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	1,120–1,124	20/4	1,571–1,574	121	
H.+R., 1988	98	1,120–1,124	25/25	1,571–1,575	>100	Сорт pure

Продолжение табл.

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
BASF, 1988	99	1,119–1,123	25/25	1,571–1,574	116	Сорт FCC
BBA, 1990	99	1,120–1,124	20/20	1,571–1,574	121	Сорт PQ
РФ, 1990	99	~1,122	20/4	1570–1,573	114	

Традиционный метод получения — окисление анетола — используется редко. Чаще всего анисовый альдегид получают окислением метилового эфира *пара*-крезола. Существует много вариантов такого окисления. Удобен для промышленного осуществления вариант окисления персульфатом калия в присутствии оксалата калия и небольших количеств солей меди (Андреева Л. К. и др., Масло-жировая пром-сть, 1975, № 8, с. 25).

Хорошие результаты дает способ метилирования *пара*-гидроксибензальдегида.

Анисовый альдегид используется во многих парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.67. Анисилпропаналь

2-Метил-3(4-метоксифенил)-пропаналь, p-Methoxy-α-methylhydrocinnamaldehyde (RIFM), Canthoxal (IFF), Paraxonal (Dragoco), Anisylpropanal (BASF)

$C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

CHO
CH₃O

C. A. 5462-06-6

Запах — сильный, цветочный, с оттенками запаха фенхеля, базилика. Жидкость, т. кип. 108°С/0,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	95	1,039–1,047	20/4	1,517–1,522	>100
Dragoco, 1989	95	1,041–1,047	20/4	1,517–1,522	>100
BASF, 1988	95	1,040–1,045	25/25	1,520–1,524	122

Получают конденсацией анисового альдегида с пропионовым альдегидом и последующим селективным гидрированием.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках обычно при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.68. *орто*-Метоксикоричный альдегид

3-(2-Метоксифенил)-2-пропеналь, *ortho*-Methoxy cinnamic aldehyde (Arc. 1868), Heliopan (H.+R.).

$C_{10}H_{10}O_2$; 162,19

CHO
OCH₃

C. A. 1504-74-1

Содержится в китайском коричном ЭМ.

Запах — сильный, пряно-цветочный.

Кристаллическое вещество, т. пл. 45–46°С, т. кип. 295°С/1013 гПа, 160–161°С/16 гПа.

Продажный продукт H.+R. (1990) содержит не менее 98% альдегида (оксим.) и имеет минимальную т. пл. 43°С; т. всп. >100°С. Возможный путь получения — конденсация *орто*-метоксибензальдегида с ацетальдегидом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.69. Феноксиацетальдегид

Феноксиуксусный альдегид, Phenoxy acetaldehyde (Arc. 2462, RIFM), Cortex aldehyde (IFF).

$C_8H_8O_2$; 136,15

C. A. 2120-70-9

Запах — сильный цветочный с оттенком запаха зелени, альдегидный. Жидкость, т. кип. 78–80°С/5,3 гПа; n_D^{20} 1,538.

Вырабатываемый IFF (1992) Cortex aldehyde 50 представляет собой раствор альдегида в бензиловом спирте. Этот продукт содержит 45–55% альдегида (оксим.) и имеет d_4^{20} 1,121–1,141; n_D^{20} 1,545–1,565; т. всп. 90°С.

Обычно получают взаимодействием фенолята натрия с диметилацеталем хлораля с последующим превращением полученного ацеталя в альдегид. Возможно получить феноксиацетальдегид окислением фенилглицидилового эфира иодной кислотой (Л. К. Андреева и др., Журн. орг. хим., 1978, 14, № 6, с. 1285). Синтез феноксиацетальдегида окислением или дегидрированием феноксиэтанола осуществить с приемлемым выходом не удается.

Применяют в некоторых парфюмерных композициях при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.70. *пара*-Метилфеноксиацетальдегид

4-Метилфеноксиуксусный альдегид, XI-Aldehyde (IFF).

$C_9H_{10}O_2$; 150,18

C. A. 67845-46-9

Запах — свежий, цветочно-фруктовый.

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), представляет собой раствор названного альдегида в спирте и диэтилфталате. Содержание альдегида не менее 48% (ГЖХ), этилового спирта ~20%; d_4^{20} 0,989–0,995, n_D^{20} 1,466–1,472.

Методы получения аналогичны способам синтеза феноксиацетальдегида.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

6.71–6.88. АЦЕТАЛИ

6.71. Диметилацеталь фенилацетальдегида

1,1-Диметокси-2-фенилэтан, Phenylacetaldehyde dimethylacetal (Arc. 2485, RIFM, GIV, H.+R.), Vert de lilas (Firm.), Rosal (Miltitz).

$C_{10}H_{14}O_2$; 166,22

C. A. 101-48-4

Запах — зелени, лепестков розы, гиацинта. Жидкость, т. кип. 219–221°С/1002 гПа; 99–101°С/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,5 мл/г (крысы), derm. LD_{50} >2 мл/г (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп. °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	95	1,000–1,004	25/25	1,493–1,496	88	ФАА <1%
H.+R., 1988	98	1,002–1,006	25/25	1,493–1,496	88	
Miltitz, 1991	98	1,004–1,008	20/20	1,493–1,496	89	
РФ, 1990	92	~ 1,002	20/4	1,494–1,496	93	ФАА <1,8%
Firm., 1992	-	1,003–1,009	20/20	1,492–1,497	84	

Получают взаимодействием фенилацетальдегида с метанолом при катализе кислотами или катионитами.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и моющих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.72. Диизоамилацеталь фенилацетальдегида

1,1-Диизоамилокси-2-фенилэтан, Phenylacetaldehyde diisoamylacetal (Arc. 2475), Neofolial (Dragoco).

$C_{18}H_{30}O_2$; 278,44

Запах — травы и зелени с нотой нарцисса. Жидкость, т. кип. 163–168°С/4 гПа.

По данным Dragoco, продажный продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_4^{20} 0,910–0,920, n_D^{20} 1,470–1,480; т. всп. >110°C.

Рекомендуется применять в парфюмерных композициях и отдушках.

6.73. Дигеранилацеталь фенилацетальдегида

Phenylacetaldehyde digeranylacetal (Arc. 2480), Rosetal A (IFF). $C_{28}H_{42}O_2$; 410,64

C. A. 67634-02-0

Запах — типа запаха розы-абсолю, стойкий. Маслянистая жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) имеет d_4^{20} 0,944–0,951; n_D^{20} 1,512–1,518; т. всп. >100°C.

Рекомендуется прнменять в парфюмерных композициях и отдушках прн дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.74. Этиленгликольацеталь фенилацетальдегида

2-Бензил-1,3-диоксолан, Phenylacetaldehyde ethylenglycol acetal (Arc. 2487, RIFM), Phenyl acetaldehyde ethylene acetal (GIV). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C. A. 101-49-5

Запах — сильная нота зелени с оттенком запаха розы. Жидкость, т. кип. 115–120°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 2,2 мл/г (крысы), derm. LD_{50} 2,6 мл/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961): d_{25}^{25} 1,084–1,088; n_D^{20} 1,519–1,522; т. всп. >100°C, содержание свободного фенилацетальдегида не должно превышать 2%.

Получают взаимодействием фенилацетальдегида с этиленгликолем в присутствии кислых катализаторов.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.75. Глицеринацеталь фенилацетальдегида

Смесь 2-бензил-4-гидроксиметил-1,3-диоксолана и 2-бензил-5-гидрокси-1,3-диоксана, Phenylacetaldehyde glycerylacetal (Arc. 2488, RIFM, IFF), Acetal CD (GIV). $C_{11}H_{14}O_3$; 194,23

I.

II.

C. A. 29895-73-6

Запах — тонкий, свежей зеленн, ноты запаха розы, гиацинта.

Жидкость, т. кип. 140°C/4 гПа (изомер II) и т. кип. 145°C/4 гПа (изомер I), соотношение I:II=6:4.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 1,7 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 2 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	95 (сумма 4 изомеров)	1,157–1,166	1,530–1,536	>100
РФ, 1990	91 (ФАА-отсутствие)	~1,158	1,529–1,532	143
IFF, 1992	97 (сумма 4 изомеров)	1,154–1,162	1,529–1,534	95

Получают взаимодействием фенилацетальдегида с глицерином в присутствии кислых катализаторов (Яковлева Г. Ф. и др., Пищевая пром-сть, 1992, № 1, с. 38).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.76, 2-Метилпентан-2,4-диолацеталь фенилацетальдегида

2-Бензил-4,4,6-триметил-1,3-диоксан, Reseda body (IFF). $C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

C. A. 67633-94-7

Запах — гиацинта, нарцисса, резеды.

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит не менее 98% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_4^{20} 0,993–1,001; n_D^{20} 1,495–1,500; т. всп. >100°C.

Получают взаимодействием фенилацетальдегида с 2-метилпентан-2,4-диолом в присутствии кислых катализаторов.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках обычно при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

6.77. Диметилацеталь гидратропового альдегида

Диметилацеталь 2-фенилпропаналя, 1,1-диметокси-2-фенилпропан, Hydratropaldehyde dimethylacetal (Arc. 1700, BASF), Hydratropic aldehyde dimethylacetal (RIFM, GIV, IFF), 2-Phenylpropanal dimethyl acetal (Hüls).

$C_{11}H_{16}O_2$; 180,25

OCH3
OCH3

C. A. 90-87-9

Запах — зелени, ноты запаха земли, грибов. Жидкость, т. кип. 70°C/2 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 1,85 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	95	0,989–0,994	25/25	1,492–1,497	92	Альдегиды ≤3%
BASF, 1988	98	0,989–0,993	25/25	1,492–1,494	96	
Hüls, 1990	98	~0,993	20/4	-	95	
IFF, 1992	96	0,989–0,997	25/25	1,492–1,497	83	

Получают взаимодействием гидратропового альдегида с метанолом в присутствии кислых катализаторов.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.78. Этиленгликольацеталь гидратропового альдегида

Этиленгликольацеталь 2-фенилпропаналя, Hydratropaldehyde ethylenglycolacetal (Arc. 1703), Hydratropic aldehyde glycol acetal (IFF), 2-Phenylpropanal glycol acetal (Hüls).

$C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 4362-22-5

Запах—земли, грибов (шампиньонов) с оттенком запаха зелени.

Продукт, вырабатываемый Hüls (1990), представляет собой жидкость, содержащую не менее 98% ацеталя (ГЖХ) и имеющую d_4^{20} ~ 1,069; т. всп. ~119°C. Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) названного ацеталя и имеет d_4^{20} 1,065–1,073; n_D^{20} 1,515–1,519; т. всп. >100°C.

Получают взаимодействием гидратропового альдегида с этиленгликолем в присутствии кислых катализаторов.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.79. Пропиленгликольацеталь гидратропового альдегида

4-Метил-2-(1-фенилэтил)-1,3-диоксолан, Hydratropaldehyde propylenglycolacetal (Arc. 1704), Cyclotropal (IFF), Vertelon (Quest), 2-Phenylpropanal methyl glycol acetal (Hüls).

$C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C. A. 67634-23-5

Запах — фруктовый, с грибной нотой. Жидкость, смесь изомеров

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	1,028–1,036	20/4	1,503–1,507	>100
Quest, 1989	97	~ 1,033	20/20	~ 1,506	>100
Hüls, 1990	98	~1,033	20/4	-	121

Получают взаимодействием гидратропового альдегида с 1,2-пропиленгликолем в присутствии кислых катализаторов.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.80. Диэтилацеталь гелиотропина

Диэтилацеталь пиперональ, Heliotropine diethylacetal (Arc. 1485, IFF). $C_{12}H_{16}O_4$; 224,26

C. A. 40527-42-2

Запах — мягкий, цветочный, с пряной нотой. Жидкость, т. кип. 279–281°C/1013 гПа, 153–154°C/15 гПа.

Вырабатываемый IFF (1992) продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) диэтилацеталя и имеет d_4^{20} 1,113–1,121; n_D^{20} 1,499–1,504; т. всп. 85°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.81. Диметилацеталь жасминальдегида

1,1-Диметокси-2-бензилиденгептан, Amylcinnamic aldehyde dimethyl acetal (Arc. 155, IFF), *alpha*-Amylcinnamic aldehyde dimethyl acetal (RIFM, GIV). $C_{16}H_{24}O_2$; 248,37

C. A. 91-87-2

Запах — мягкий, цветов жасмина, стойкий. Жидкость, смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не более 3% амилкоричного альдегида и имеет d_{25}^{25} 0,953–0,958; n_D^{20} 1,505–1,508; т. всп. 92°C.

IFF (1992) вырабатывает продукт, содержащий не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров названного ацеталя. Он имеет d_{25}^{25} 0,953–0,963; n_D^{20} 1,508–1,513; т всп 92°C.

Получают взаимодействием жасминальдегида с метанолом в присутствии кислого катализатора.

Применяется в парфюмерных композициях при дозировке до 10%. Особенно пригоден для мыльных отдушек. Ограничений IFRA нет.

6.82. Диэтилацеталь жасминальдегида

1,1-Диэтилокси-2-бензилиденгептан, Amylcinnamic aldehyde diethyl acetal (Arc. 154, RIFM), *alpha*-n-Amyl cinnamic aldehyde diethyl acetal (IFF). $C_{18}H_{28}O_2$; 276,42

C. A. 60763-41-9

Запах — цветочный (жасмина) с нотами запаха яблок, зелени. Жидкость, смесь (E)- и (Z)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит не менее 95% (ГЖХ) диэтилацеталя (сумма двух изомеров) и имеет d_4^{20} 0,931–0,939; n_D^{20} 1,495–1,500; т. всп. 72°C.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках для мыла при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.83. Диметилацеталь 2,2-диметил-3-фенилпропаналя

1,1-Диметокси-2,2-диметил-3-фенилпропан, Amarocit B (Wacker). $C_{13}H_{20}O_2$ 208,30

Запах — сладко-фруктовый, с цветочными нотами. Жидкость, т. кип. 120°C/16 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~98% (ГЖХ) диметилацеталя и имеет d_4^{20} ~ 0,976; n_D^{20} 1,492–1,496; т. всп. 98°C.

Может быть приготовлен ацетализацией 2,2-диметил-3-фенилпропаналя, получение которого возможно алкилированием изомасляного альдегида хлористым бензилом (Гуревич А. В. и др., Масло-жировая пром-сть, 1980, № 12, с. 29).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.84. Этилфенилэтилацеталь ацетальдегида

1-Этокси-1-фенилэтилоксиэтан, Ethyl phenylethyl acetal (Arc. 1337) Hyacinth body (IFF , Efetaal, Fioryvert, Verdilin (Quest), Vertocinth (BBA).

$C_{12}H_{18}O_2$; 194,27

С. А. 2556-10-7

Запах — свежий цветочный, ноты гиацинта, настурции, розы. Жидкость, т. кип. 110°C/6,7 гПа; 92°C/2,7 гПа.

Острая токсичность 98%-ного продукта, по данным Naarden (1985): oral LD_{50} >10 мл/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	96	0,954-0,962	20/4	1,478-1,483	>100
Quest, 1989, Efetaal	98	0,958-0,961	20/20	1,478-1,481	86
Quest, 1989, Fioryvert	95	0,958-0,962	20/20	1,478-1,482	91
Quest, 1989, Verdilin	-	~0,981	20/4	~ 1,496	91
BBA, 1990	98	~ 0,958	20/20	~1,482	>100
KHP, 1990	95	0,955-0,962	20/20	1,477-1,483	93,5

Может быть получен из диэтилацеталя ацетальдегида и фенилэтилового спирта методом "переацетализации" (катализатор соляная кислота и др.) или взаимодействием фенилэтилового спирта с винилэтиловым эфиром.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 6%. Ограничений IFRA нет.

6.85. Пропилфенилэтилацеталь ацетальдегида

1-Пропокси-1-фенилэтилоксиэтан, Acetal R (GIV), Resedafol (H.+R.), Hyacinth body № 3 (IFF), Scillal (Quest).

$C_{13}H_{20}O_2$; 208,30

С. А. 7493-57-4

Запах — сильный, зеленых листьев, цветочный, ноты гиацинта, настурции, сирени. Жидкость.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	96	0,947-0,951	20/4	1,477-1,481	93
H.+R., 1988	96	0,945-0,950	25/25	1,477-1,481	>100
IFF, 1992	95	0,945-0,953	20/4	1,477-1,483	>100
Quest, 1989	—	~0,974	20/20	~1,497	>94

Может быть получен "переацетализацией" дипропилацеталя ацетальдегида фенилэтиловым спиртом или взаимодействием фенилэтилового спирта с винилпропиловым эфиром.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках для мыла при дозировке обычно -- до 1%, в редких случаях — до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.86. Гиацинталь

Бутилфенилэтилацеталь ацетальдегида, 1-бутокси-1-фенилэтилоксиэтан, Hyacinthal (РФ).

$C_{14}H_{22}O_2$; 222,33

С. А. 64557-91-9

Запах — гиацинта с нотой зелени.

Жидкость, т. кип. 267-270°C/1013 гПа; 112,5-113,5°C/4 гПа, d_4^{20} 0,936.

Продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 95% смешанного ацеталя и имеет n_D^{20} 1,477–1,488; т. всп 120°C.

Получают взаимодействием фенилэтилового спирта с винилбутиловым эфиром в присутствии катионита (Н. Я. Зырянова и др., Масложировая пром-сть, 1978, № 4, с. 34).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла.

6.87. Флоропал

2,4,6-Триметил-4-фенил-1,3-диоксан, Floropal (H.+R.), Vertacetal (Dragoco). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

Запах — свежий, травянистый, с оттенком запаха грейпфрута. Жидкость.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание суммы двух изомеров (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	90	1,014–1,024	25/25	1,502–1,518	114
Dragoco	95	1,015–1,025	20/4	1,499–1,509	96

Может быть получен взаимодействием *альфа*-метилстирола с уксусным альдегидом по реакции Принса.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

6.88. Дифенилэтилацеталь ацетальдегида

1,1-Дифенилэтилоксиэтан, Phenyl ethyl acetal (Arc. 2511, GIV). $C_{18}H_{22}O_2$; 270,38

Запах — зеленых листьев, бальзамический, стойкий. Жидкость.

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 95% ацеталя и не более 0,5% свободного альдегида и имеет d_{25}^{25} 1,018–1,020; n_D^{20} 1,528–1,532, т. всп. 96°C.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках.

6.89–6.101. КЕТОНЫ

6.89. Ацетофенон

Метилфенилкетон, ацетилбензол, Acetophenone (Arc. 24, RIFM, GIV, H.+R.). C_8H_8O; 120,15

C. A. 98-86-2

Содержится в кастореуме, лабдануме, а также в ЭМ ириса, зеленого чая и др.

Запах — сильный, ноты мимозы, боярышника, черемухи. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 20,5°C; т. кип. 202°C/1013 гПа; 87°C/17,5 гПа; γ_{20} 39,9 дин/см; σ_{20} 1,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (морские свинки).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (оксим.), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °C	Т всп., °C
GIV, 1961	98	1,025–1,028	1,533–1,535	19	80
H.+R., 1988	98	1,024–1,028	1,532–1,535	19,2	76

Получают очисткой технического ацетофенона — отхода производства фенола и ацетона из изопропилбензола.

Используется в небольших дозах, главным образом в отдушках для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии. Ограничений IFRA нет

6.90. *пара*-Метилацетофенон

Метил-*пара*-толилкетон, 4-ацетилтолуол, *para*-Methyl acetophenone (Arc. 1895, GIV), p-Methylacetophenone (RIFM, H.+R.), Methylacetophenon (Miltitz).

$C_9H_{10}O$; 134,18

С. А. 122-00-9

Содержится в ЭМ гималайского кедра, линалоевом, мимозы.

Запах — сильный, цветочный, типа черемухи, акации, боярышника. Жидкость, т. пл. — 23°С; т. кип. 227°С/1013 гПа; 93°С/9,3 гПа; 68°С/1,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,4 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	98 (оксим.)	1,001–1,004	25/25	1,532–1,535	96	Отсутствие Cl
H.+R., 1988	98 (оксим.)	1,001–1,005	25/25	1,532–1,535	97	
Miltitz, 1991	97 (ГЖХ)	1,004–1,008	20/20	1,532–1,534	91	

Получают ацетилированием толуола по Фриделю — Крафтсу.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств в дозах до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.91. Бензилацетон

4-Фенилбутан-2-он, метилфенилэтилкетон, Benzyl acetone (Arc. 288, RIFM), Benzylacetone (H.+R., Miltitz).

$C_{10}H_{12}O$, 148,21

С. А. 2550-26-7

Содержится в экстракте алоэ.

Запах — цветочный, травянистый, с нотами жасмина. Жидкость, т. кип. 235°С/1013 гПа; 115°С/17 гПа; γ_{20} 38,4 дин/см; σ_{20} 2,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} 3,2 (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (оксим.), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
H.+R., 1988	98	0,985–0,990	25/25	1,510–1,513	105
Miltitz, 1991	97	0,987–0,992	20/20	1,510–1,514	105

Получают селективным каталитическим гидрированием продукта конденсации бензальдегида с ацетоном. В соответствии с рекомендацией IFRA товарный продукт не должен содержать бензилиденацетона.

Используют главным образом в отдушках для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии.

6.92. Метилфенилпентанон

2-Метил-2-фенилпентан-4-он, Vetikon (Dragoco).

$C_{12}H_{16}O$; 176,26

С. А. 7403-42-1

Запах — пряный, с нотами ветиверии, гардении. Жидкость.

Продажный продукт, вырабатываемый Dragoco (1989), содержит не менее 95 % (ГЖХ) названного кетона и имеет d_4^{20} 0,970–0,976; n_D^{20} 1,508–1,512; т. всп. > 110°С.

Получают конденсацией бензола с мезитилоксидом при катализе $AlCl_3$.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в качестве сырья для производства ветиверкетона. Ограничений IFRA нет.

6.93. Метилфенилгексанон

2-Метил-2-фенилгексан-4-он, 2-Methyl-2-phenyl hexanone-4 (Arc. 2194), 4-Damascol (IFF). $C_{13}H_{18}O$; 190,28

C. A. 4927-36-0

Запах — древесно-камфарный, при разбавлении — ноты запаха розы. Продукт, вырабатываемый IFF (1992), представляет собой жидкость, содержащую не менее 97 % (ГЖХ) названного кетона и имеющую d_4^{20} 0,959–0,967; n_D^{20} 1,503–1,508; т. всп. > 100°С.

Может быть получен конденсацией бензола с этилизобутенилкетоном (2-метил-2-гексен-4-оном) при катализе $AlCl_3$.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5 %. Ограничений IFRA нет.

6.94. Фраванон

3-Бензил-3-метил-4-пентен-2-он, Frawanon (Wacker). $C_{13}H_{16}O$; 188,27

Запах — напоминает запах малины, с оттенками табака, дымящей древесины.

Продукт, вырабатываемый Wacker (1987), содержит около 99 % названного кетона и имеет т. кип. 67°С/0,02 гПа; $d_{20}^{20} \sim 0,991$; n_D^{20} 1,518–1,525; т. всп. 105°С.

Может быть получен взаимодействием хлористого бензила с 3-метил-3-пентен-2-оном в условиях катализа фазового переноса.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.95. Ацетиланизол

пара-Метоксиацетофенон, Acetanisole (Arc. 13, GIV, IFF), p-Methoxyacetophenone (RIFM). $C_9H_{10}O_2$; 150,18

C. A. 100-06-1

Запах — сильный, стойкий, сена, с цветочными нотами мимозы, боярышника. Кристаллическая масса, т. пл. 39°С; т. кип. 263°С/1013 гПа; 158°С/48 гПа; 136°С/13 гПа; P_{20} $2{,}3 \cdot 10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	36	>100	Отсутствие Cl
H.+R., 1988	99	36	>100	Отсутствие Cl
IFF, 1992	98	35	97	
РФ, 1990	—	35–37	121	Отсутствие фенола

Получают ацетилированием анизола.

В РФ ацетилирование ведут уксусным ангидридом при катализе $FeCl_3$ (Цукерваник И. П., Вальникова П. Ю., ДАН Уз. ССР, 1967, № 10, с. 34; РЖХ 1968, 11Ж199).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5 %. Ограничений IFRA нет.

6.96. Кетон малины

4-(4-Гидроксифенил)-бутан-2-он, *пара*-гидроксибензилацетон, *para*-Hydroxy phenylbutanone (Arc. 176), 4-(p-Hydroxyphenyl)-2-butanone (RIFM), Frambinon (Dragoco), Oxyphenylon (IFF), Raspberry ketone (BBA, TAK).

$C_{10}H_{12}O_2$; 164,22

C. A. 5471-51-2

Содержится в соке малины.

Запах — сладко-фруктовый, близкий к запаху малины. Кристаллы, т. пл. 82–83°С.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Т. пл., °С	Т. всп., °С
Dragoco, 1989	—	82–84	>100
IFF, 1992	97	80	>101
BBA, 1990	96	81	>100
TAK, 1987	98	83–85	>95
РФ, 1990	98,5	81–82	—

Получают конденсацией *пара*-гидроксибензальдегида с ацетоном в присутствии раствора едкого натра и последующим селективным гидрированием (катализатор — никель на окиси хрома) ненасыщенного кетона (Г. И. Молдованская и др., Масло-жировая пром-сть, 1981, № 7, с. 27). Возможно также получение конденсацией фенола с метилвинилкетоном при катализе серной кислотой (Porsch F., пат. ФРГ 1079065, 13.10.60, РЖХ, 1961, 19Л142; Г. В. Шимайская и др., Масло-жировая пром-сть, 1978, № 3, с. 34).

Применяют в парфюмерных композициях и в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.97. Метоксифенилбутанон

4-(4-Метоксифенил)-бутан-2-он, *пара*-метоксибензилацетон, анисилацетон, Anisyl acetone (Arc. 248, BASF, Miltitz), 4-(p-Methoxyphenyl)-butan-2-one (RIFM), Ketanone (Roure).

$C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 104-20-1

Запах — цветочно-фруктовый, ноты малины, акации, фенхеля. Жидкость, т. кип. 245°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Roure, 1982	—	~1,048	~1,519	148
Miltitz, 1991	98 (оксим.)	1,043–1,047	1,519–1,522	>100

Получают конденсацией анисового альдегида с ацетоном в присутствии раствора щелочи и последующим селективным каталитическим гидрированием.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

6.98. Пиперонилацетон

4-(3,4-Метилендиоксифенил)-бутан-2-он, 3,4-метилендиоксибензилацетон, пиролон, Heliotropyl acetone (Arc. 1488), Piperonyl acetone (RIFM), Dulcinyl (IFF).

$C_{11}H_{12}O_3$; 192,22

C. A. 55418-52-5

Запах — мягкий цветочный, с нотами малины, аниса и древесным оттенком. Кристаллическое вещество, т. пл. 55°C, т. кип. 164–165°C/15 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) кетона и имеет минимальную т. пл. 47°C.

Может быть получен конденсацией гелиотропина с ацетоном в присутствии раствора щелочи и последующим селективным гидрированием.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.99. Цингерон

4-Гидрокси-3-метоксибензилацетон, 4-(4-гидрокси-3-метоксифенил)-бутан-2-он, Zingerone (Arc. 3101, RIFM, GIV). $C_{11}H_{14}O_3$; 194,23

C. A. 122-48-5

Содержится в ЭМ имбиря.

Запах — пряный, тяжелый, цветочный, ноты имбиря, ванили Кристаллизующаяся жидкость или кристаллы, т. пл. 40–41°C; т. кип. 189–190°C/21 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 2,58 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 93% кетона (оксим.) и имеет d_{25}^{25} 1,138–1,139; n_D^{20} 1,544–1,545; т. всп. 99°C.

Может быть получен конденсацией ванилина с ацетоном в присутствии раствора щелочи и последующим селективным восстановлением или гидрированием (А. Я. Берлин, С. М. Шерлин, Журн. общ. хим., 1948, 18, № 7, с. 1386).

Рекомендуется применять в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.100. Бензофенон

Дифенилкетон, Benzophenone (Arc. 280, RIFM, GIV, H.+R., BBA) $C_{13}H_{10}O$; 182,22

C. A. 119-61-9

Запах — слабый, приятный, с нотами розы, герани, стойкий.

Кристаллы или хлопья, т. пл. 48°C; т. кип. 200,5°C/63 гПа, P_{20} $3{,}7 \cdot 10^{-4}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} > 10 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	-	47	-	Отсутствие Cl
H.+R., 1988	99,5	47	145	Отсутствие Cl
BBA, 1990	-	47	>100	—

Получают действием бензоилхлорида на бензол по Фриделю — Крафтсу или окислением дифенилметана.

Используют в большом ассортименте парфюмерных композиций, отдушек для мыла и моющих средств, учитывая химическую устойчивость и способность фиксировать запах более летучих компонентов. Ограничений IFRA нет.

6.101. Метилнафтилкетон

Метил-*бета*-нафтилкетон, 2-ацетилнафталин, *beta*-Methyl naphtyl ketone (Arc. 2124, RIFM), Methyl-*beta*-naphtylketon (H.+R.), Oranger crystals (GIV). $C_{12}H_{10}O$; 170,21

C. A. 93-08-3

Запах — при разбавлении — приятный, подобный запаху апельсина, цветов апельсина. Кристаллическое вещество, т. пл. 56°C; т. кип. 300-301°C/1013 гПа; 171-173°C/17 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 0,6 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	53	>100
H.+R., 1990	98	53	>100
Dragoco, 1990	98	53	>100

Получают ацетилированием нафталина действием хлористого ацетила или уксусного ангидрида в присутствии примерно эквимолярного количества $AlCl_3$.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках для мыла и моющих средств при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

6.102-6.185. СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ

6.102. Бензилформиат

Benzyl formate (Arc. 314, RIFM, GIV, BBA, H.+R., IFF). $C_8H_8O_2$; 136,15

C. A. 104-57-4

Содержится в ЭМ *Rosa rugosa*.

Запах — сильный, фруктово-пряный, с оттенками запаха жасмина, черной смородины. Жидкость, т. кип. 202°C/1013 гПа; 84-85°C/13 гПа; γ_{20} 40,0 дин/см; σ_{20} 2,2 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 1,7 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} 2 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота, %	Метод анализа	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	90	Омыл.	1,083–1,092	25/25	1,510–1,514	83
H.+R., 1988	95	Омыл.	1,084–1,090	25/25	1,511–1,513	83
BBA, 1990	95	ГЖХ	1,085–1,092	20/20	1,510–1,513	83
IFF, 1992	95	ГЖХ	1,084–1,092	25/25	1,509–1,514	82

Получают этерификацией муравьиной кислоты бензиловым спиртом. Может быть также получен действием окиси углерода на бензиловый спирт при катализе алкоголятами щелочных металлов (80-90°C, 200 атм.).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

6.103. Бензилацетат

Benzyl acetate (Arc. 286, RIFM, GIV, H.+R., Quest, BBA, IFF), Benteine (BBA). $C_9H_{10}O_2$; 150,18

C. A. 140-11-4

Содержится в ЭМ крупноцветного жасмина, иланг-иланга, туберозы и многих других.

Запах — сильный, цветочный (жасмина), с легким фруктовым оттенком. Жидкость, т. кип. 215°C/1013 гПа; 110°C/35 гПа; 66-67°C/4 гПа; P_{20} 0,13 гПа, γ_{20} 38,6 дин/см, σ_{20} 2,3 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 2,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальная чистота, %	Метод анализа	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	Омыл.	1,052–1,054	25/25	1,501–1,503	105
H.+R., 1988	99	ГЖХ	1,053–1,056	25/25	1,501–1,503	102
Quest, 1989	-	-	1,052–1,054	25/25	1,501–1,503	> 100
РФ, 1990, в/с	99,5	Омыл.	1,053–1,058	20/4	1,501–1,503	102
BBA, 1990, Benteine	99	ГЖХ	1,055–1,057	20/20	1,502–1,504	93
BBA, 1990, PQ	98	ГЖХ	1,055–1,057	20/20	1,502–1,504	93
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,051–1,059	25/25	1,499–1,504	91

Самый распространенный способ получения бензилацетата состоит в этерификации уксусной кислоты бензиловым спиртом. При этом могут быть использованы различные кислые катализаторы.

При получении бензилацетата взаимодействием хлористого бензила с водными растворами ацетата натрия возникают трудности с очисткой продукта до парфюмерных кондиций.

Еще труднее получить пригодный для парфюмерии бензилацетат окислением толуола в среде уксусной кислоты.

Бензилацетат является одним из самых распространенных душистых веществ. Его производство составляет несколько тысяч тонн в год.

Используется во многих парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

6.104. Бензилпропионат

Benzyl propionate (Arc. 338, RIFM, GIV, H.+R., Quest, BBA, IFF), Benzylpropionat (Miltitz). $C_{10}H_{12}O_2$: 164,21

C. A. 122-63-4

Запах — фруктово-цветочный, с оттенком жасмина. Жидкость, т. кип. 219–220°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод анализа	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	ГЖХ	1,029–1,033	20/4	1,496–1,500	100
H.+R., 1988	98	Омыл.	1,029–1,033	25/25	1,496–1,499	>100
Quest, 1989	98	ГЖХ	~1,030	20/4	-	-
BBA, 1990	99	ГЖХ	1,031–1,034	20/20	1,497–1,500	104
Miltitz, 1991	98	ГЖХ	1,031–1,035	20/20	1,496–1,500	100
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,027–1,035	25/25	1,495–1,499	> 100

Получают этерификацией пропионовой кислоты бензиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ввод в парфюмерные композиции обычно не превышает 10%. Ограничений IFRA нет.

6.105. Бензилбутират

Benzyl butyrate (Arc. 293, RIFM, GIV, H.+R., BBA, IFF), Aldehyde C-19 (so called). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 103-37-7

Запах — тяжелый, фруктовый, с нотой жасмина. Жидкость, т. кип. 238-240°C/1013 гПа; 130-132°C/20 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод анализа	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	Омыл.	1,006–1,009	25/25	1,492–1,496	>100
H.+R., 1988	98	Омыл.	1,005–1,010	25/25	1,490–1,495	> 100
BBA, 1990	98	ГЖХ	1,008–1,011	20/20	1,492–1,495	> 100
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,005–1,013	25/25	1,490–1,495	> 100

Получают этерификацией масляной кислоты бензиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.106. Бензилизобутират

Benzyl isobutyrate (Arc. 294, RIFM, GIV, Hüls). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 103-28-6

56–5414

Запах — фруктово-цветочный, с нотой жасмина. Жидкость, т. кип. 228°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 2,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	97 (омыл.)	1,001–1,005	25/25	1,489–1,492	100
Hüls, 1990	98 (ГЖХ)	~1,004	20/4	—	116

Получают этерификацией изомасляной кислоты бензиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.107. Бензилизовалерат

Benzyl isovalerate (Arc. 346, RIFM, GIV, IFF), Benzylisovalerianat (Miltitz). $C_{12}H_{18}O_2$; 192,26

C. A. 103-38-8

Запах — сильный, фруктово-цветочный. Жидкость, т. кип. 245°С/1013 гПа; 136°С/33 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,985–0,988	25/25	1,486–1,489	>100
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	0,986–0,991	20/20	1,486–1,489	> 100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,982–0,990	25/25	1,483–1,489	> 100

Получают этерификацией изовалериановой кислоты бензиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.108. Бензиллаурат

Бензиловый эфир лауриновой кислоты, Benzyl laurate (Arc. 324, RIFM, GIV). $C_{19}H_{30}O_2$; 290,45

C. A. 140-25-0

Запах — слабый, жирный. В соответствии со спецификацией GIV (1961) представляет собой жидкость, содержащую минимум 98% (омыл.) сложных эфиров и имеющую d_{25}^{25} 0,933-0,939; n_D^{20} 1,480-1,484; т. всп. 98°С.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В РФ путем переэтерификации этиллаурата бензиловым спиртом в присутствии поташа получают 99%-ный (омыл.) продукт с n_D^{20} 1,480-1,483.

Поскольку исходным сырьем является кокосовое масло, бензиллаурат является смесью сложных эфиров.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.109. Бензилбензоат

Benzyl benzoate (Arc. 292, RIFM, GIV, H.+R., BBA, Quest, IFF) $C_{14}H_{12}O_2$; 212,25

C. A. 120-51-4

Содержится в перуанском и толуанском бальзамах, а также в иланг-иланговом и других ЭМ.

Запах очень слабый, бальзамический. Кристаллизующаяся жидкость, т. кип. 323-324°С/1013 гПа; 170-171°С/20 гПа; т. пл. 21-22°С; P_{20} $2,5 \cdot 10^{-4}$ гПа; γ_{20} 41,3 дин/см; σ_{20} 9,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 2,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 4 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C
GIV, 1961	99	1,116–1,120	25/25	1,568–1,570	18	148
H.+R., 1988	99	1,116–1,120	25/25	1,567–1,570	18	158
РФ, 1990	99	~1,118	20/4	1,567–1,569	—	156
BBA, 1990	98	1,117—1,120	20/20	1,568–1,570	—	148
Quest, 1989	—	1,116–1,120	25/25	1,568–1,570	19	>100
IFF, 1992	98	1,113–1,121	25/25	1,566–1,571	—	>100

Получают взаимодействием бензоата натрия с хлористым бензилом или переэтерификацией метилбензоата бензиловым спиртом.

Используют в широком ассортименте парфюмерных композиций и отдушек в качестве растворителя нитромускусов и природных экстрактов, а также для округления и фиксации запаха при дозировке до 60%. Ограничений IFRA нет.

6.110. Бензилсалицилат

Benzyl salicylate (Arc. 340, RIFM, GIV, H.+R., BBA, IFF). $C_{14}H_{12}O_3$; 228,25

С. А. 118-58-1

Содержится в иланг-иланговом и некоторых других ЭМ.

Запах — слабый, бальзамический. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 24-26°C; т. кип. 208°C/35 гПа; 186°C/13 гПа; P_{20} $1,1\cdot10^{-4}$ гПа, γ_{20} 42,0 дин/см; σ_{20}17,4 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 2,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 14,1 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,176–1,180	25/25	—	23,5	>100
H.+R., 1988	98	1,176–1,180	25/25	1,580–1,582	23,5	180
BBA, 1990	98	1,177–1,180	20/20	1,579–1,582	21	163
РФ, 1990	99	~1,180	20/4	1,579–1,581	23	161
IFF, 1992	99	1,173–1,181	25/25	1,578–1,583	—	>100

Получают переэтерификацией метилсалицилата бензиловым спиртом. Может быть получен также непосредственной этерификацией салициловой кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках большого ассортимета для округления и фиксации запаха при дозировке до 40%. Ограничеиий IFRA нет.

6.111. Бензилциннамат

Benzyl cinnamate (Arc. 299, RIFM, GIV, H.+R., BASF). $C_{16}H_{14}O_2$; 238,29

С. А. 103-41-3

Содержится в стираксе, а также в перуанском и толуанском бальзамах.

Запах — слабый, сладко-бальзамический. Кристаллическое вещество, т. пл. 35-36°C; т. кип. 228-230°C/29 гПа; 195°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	Минимальная т. заст., °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	99	Омыл.	33	>100
H.+R., 1988	99	Омыл.	34	180
BASF, 1988	99	ГЖХ	33–34,5	~100

Получают этерификацией коричной кислоты бензиловым спиртом. Может быть также получен конденсацией по Кляйзену бензальдегида с бензилацетатом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках для фиксации запаха, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.112. Бензилфенилацетат

Бензиловый эфир фенилуксусной кислоты, Benzyl phenylacetate (Arc. 332, RIFM, GIV). $C_{15}H_{14}O_2$; 226,28

С. А. 102-16-9

Запах — слабый, цветочный, с оттенком запаха меда. Жидкость, т. кип. 319°С/1013 гПа; 270°С/212 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 10 мл/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продукт должен содержать не менее 98% (омыл.) сложного эфира и иметь d_{25}^{25} 1,095 – 1,099; n_D^{20} 1,553–1,558; т. всп. > 100°С.

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты бензиловым спиртом.

Используется в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.113. Фенилэтилформиат

2-Фенилэтилформиат, Phenylethyl formate (Arc 2529, RIFM, GIV, IFF, BBA). $C_9H_{10}O_2$, 150,18

С. А. 104-62-1

Запах — цветочно-травянистый, с нотами розы, хризантемы, гиацинта. Жидкость, т. кип. 221°С/1013 гПа; 94°С/12 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,2 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	90	Омыл.	1,056–1,062	25/25	1,506–1,510	99
IFF, 1992	96	ГЖХ	1,059–1,067	20/4	1,505–1,509	91
BBA, 1990	95	ГЖХ	1,059–1,063	20/20	1,506–1,510	>100
РФ, 1990	95	Омыл.	~1,060	20/4	1,506–1,509	—

Получают этерификацией муравьиной кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.114. Фенилэтилацетат

2-Фенилэтилацетат, Phenylethyl acetate (Arc. 2512, RIFM, GIV, H.+R., IFF, Quest, BASF, BBA, Miltitz) $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

С. А. 103-45-7

Содержится в ЭМ *Michelia champaca, Rosa rugosa* и др.

Запах — цветочный (розы, жасмина), с фруктовым и медовым оттенками. Жидкость, т. кип. 232,6°С/1013 гПа; 118–120°С/17 гПа, γ_{20} 36,6 дин/см; σ_{20} 2,8 спуаз, P_{20} $5,1 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. LD_{50} 6,2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98(омыл.)	1,030–1,034	25/25	1,497–1,501	>100
H.+R., 1988	98(омыл.)	1,030–1,033	25/25	1,497–1,499	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,029–1,037	20/4	1,496–1,501	>100
Quest, 1989	98 (омыл.)	1,030–1,034	25/25	1,497–1,500	100
BASF, 1987	99,5(ГЖХ)	1,030–1,034	25/25	1,497–1,501	107
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	1,032–1,035	20/20	1,498–1,500	>100
Miltitz, 1991	98 (ГЖХ)	1,032–1,036	20/20	1,497–1,500	105
РФ, 1990	99 (омыл.)	~1,034	20/4	1,498–1,501	102

Получают этерификацией уксусной кислоты фенилэтиловым спиртом. Используют в парфюмерных композициях, отдушках (дозировка до 50%) и пищевых ароматических эссенциях. Ограничеиий IFRA нет.

6.115. Фенилэтилпропионат

2-Фенилэтилпропионат, Phenylethyl propionate (Arc. 2549, RIFM, GIV, IFF, BBA), Phenylethylpropionat (Miltitz).

$C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

С. А. 122-70-3

Запах — фруктово-цветочный, ноты розы, стиракса. Жидкость, т. кип. 245°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,0 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	Омыл.	1,010–1,014	25/25	1,493–1,496	>100
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,010–1,018	20/4	1,491–1,496	>100
BBA, 1990	98	ГЖХ	1,011–1,014	20/20	1,492–1,494	>100
Miltitz, 1991	98	ГЖХ	1,012–1,017	20/20	1,493–1,496	>100

Получают этерификацией пропионовой кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках (дозировка до 20%), а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.116. Фенилэтилбутират

2-Фенилэтилбутират, Phenylethyl butyrate (Arc. 2516, RIFM, GIV, IFF).

$C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

С. А. 103-52-6

Запах — фруктовый, с оттенком запаха розы. Жидкость, т. кип. 258-260°С/1013 гПа; 125°С/13 гПа; 114°С/7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 4,6 мл/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ мл/кг (кролики).

57-5414

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98(омыл.)	0,991–0,994	25/25	1,488–1,492	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,990–0,998	20/4	1,488–1,492	>100

Получают этерификацией масляной кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.117. Фенилэтилизобутират

2-Фенилэтилизобутират, Phenylethyl isobutyrate (Arc. 2517, RIFM, GIV, H.+R., IFF), Phenylethylisobutyrat (Miltitz). $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

С. А. 103-48-0

Запах — фруктовый, ноты меда, розы. Жидкость, т. кип. 230°С/1013 гПа; 122–124°С/20 гПа; 99°С/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 5,2 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	0,987–0,990	25/25	1,486–1,490	>100
H.+R., 1988	98	0,987–0,991	25/25	1,486–1,490	>100
IFF, 1992	97	0,986–0,994	20/4	1,485–1,490	>100
Miltitz, 1991	98	0,990–0,994	20/20	1,486–1,489	112
РФ, 1990	97	~0,990	20/4	1,488–1,491	—

Получают этерификацией изомасляной кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках (дозировка обычно до 10%), а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.118. Фенилэтилизовалерат

2-Фенилэтилизовалерат, Phenylethyl isovalerate (Arc. 2558, RIFM, GIV), Phenylethylisovalerianat (Miltitz). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

С. А. 140-26-1

Запах — сильный, фруктовый, с нотой розы. Жидкость, т. кип. 263°С/1013 гПа; 141–145°С/72 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral. LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (омыл.), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	0,973–0,976	25/25	1,484–1,486	>100
Miltitz, 1991	98	0,974–0,980	20/20	1,484–1,487	>100

Получают этерификацией изовалериановой кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.119. Фенилэтилтиглат

2-Фенилэтиловый эфир 2-метил-2-бутеновой кислоты, Phenylethyl tiglate (Arc. 2555, RIFM), Phenylethyltiglat (Wacker). $C_{13}H_{16}O_2$; 204,27

С. А. 55719-85-2

Содержится в африканском гераниевом и в розовом ЭМ.

Запах — приятный, травянисто-цветочный, с нотами розы, сухих листьев, стойкий. Жидкость, т. кип. 139-140°С/9,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый Wacker (1987), содержит ~99% названного сложного эфира и имеет d_4^{20} ~ 1,018; n_D^{20} 1,512–1,516, т. всп. 125°С.

Получают этерификацией тиглиновой кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.120. Фенилэтил-2-метилбутират

Фенилэтиловый эфир 2-метилмасляной кислоты, Phenylethyl-2-methylbutyrate (Arc. 2537, RIFM), Anatolyl (Roure). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

С. А. 24817-51-4

Запах — сильный, цветов (розы) и зелени.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый Roure, содержит ~97,5% сложного эфира и имеет d_{20}^{20} ~ 0,977; n_D^{20} ~1,485; т. всп. 129°С.

Получают этерификацией 2-метилмасляной кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.121. Фенилэтилпивалат

2-Фенилэтиловый эфир, 2,2-диметилпропионовой кислоты, Pivarose (Quest), Centifolyl (Roure). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

С. А. 67662-96-8

Запах — цветов розы, напоминает запах родинола.

Жидкость, т. кип. 100°С/6,7 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Чистота (ГЖХ), %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Quest, 1989	99	0,971–0,973	1,481–1,484	121
Roure	—	~0,972	~1,481	116

Может быть получен этерификацией пивалиновой кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используется для парфюмерных композиций цветочного направления запаха при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.122. Фенилэтилбензоат

2-Фенилэтилбензоат, Phenylethyl benzoate (Arc. 2515, RIFM, GIV, IFF). $C_{15}H_{14}O_2$; 226,28

С. А. 94-47-3

Запах — мягкий, бальзамический, с нотой розы. Жидкость, т. кип 333°С/1013 гПа; 104°С/16 гПа; 93°С/8 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	1,092–1,096	25/25	1,558–1,562	>100
IFF, 1992	97	1,091–1,099	20/4	1,557–1,562	>100
РФ, 1990	97	~1,095	20/4	1,559–1,561	—

Получают этерификацией бензойной кислоты или переэтерификацией метилбензоата фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.123. Фенилэтилсалицилат

2-Фенилэтилсалицилат, Phenylethyl salicylate $C_{15}H_{14}O_3$; 242,28 (Arc. 2551, RIFM, GIV, IFF).

С. А. 87-22-9

Запах — слабый, бальзамический, с нотой розы. Кристаллическое вещество, т. пл. 44°С.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	Минимальная т. пл. °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	Омыл.	41	—
IFF, 1992	97	ГЖХ	41	>100
РФ, 1990	98	Омыл.	41–43	—

Получают этерификацией салициловой кислоты или переэтерификацией метилсалицилата фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.124. Фенилэтилциннамат

2-Фенилэтилциннамат, Phenylethyl cinnamate $C_{17}H_{16}O_2$; 252,32 (Arc. 2522, RIFM, GIV, IFF).

С. А. 103-53-7

Запах — слабый, бальзамический, с нотами меда, смородины. Кристаллическое вещество, т. пл. 58°С.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	Минимальная т. пл., °С
GIV, 1961	98	Омыл.	54
IFF, 1992	97	ГЖХ	54
РФ, 1990	98	Омыл.	55

Получают этерификацией коричной кислоты или петеэтерификацией метилциннамата фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.125. Фенилэтилфенилацетат

Фенилэтиловый эфир фенилуксусной кислоты, Phenylethyl phenylacetate (Arc. 2584, RIFM, GIV, H.+R., IFF). $C_{16}H_{16}O_2$; 240,31

С. А. 102-20-5

Запах — мягкий, с нотами розы, меда. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 26,5°С; т. кип. 330°С/1013 гПа; 210°С/27 гПа; 177–178°С/6 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 15,3 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	Омыл.	1,079–1,082	25/25	—	26	>100
H.+R., 1988	98	Омыл.	—	—	—	26	>100
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,078–1,086	20/4	1,547–1,552	27	>100
РФ, 1990	98,5	Омыл.	—	—	1,549–1,550	—	—

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты фенилэтиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.126. Фенилпропилацетат

3-Фенилпропилацетат, 3-Phenyl propyl acetate (Arc. 2588), Phenylpropyl acetate (RIFM, GIV, BBA, Hüls, IFF). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 122-72-5

Содержится в ЭМ акации, нарцисса и др.

Запах — фруктово-цветочный, бальзамический. Жидкость, т. кип. 245°C/1013 гПа; P_{20} $1,72 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 4,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98(омыл.)	1,012–1,015	25/25	1,494–1,497	>100
BBA, 1990	98(ГЖХ)	1,014–1,017	20/20	1,495–1,498	118
Hüls, 1990	98(ГЖХ)	~1,016	20/4	—	130
IFF, 1992	97(ГЖХ)	1,011–1,019	25/25	1,494–1,498	>100

Получают этерификацией уксусной кислоты фенилпропиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.127. Фенилпропилпропионат

3-Фенилпропилпропионат, 3-Phenyl propyl propionate (Arc. 2600, RIFM, IFF), Phenylpropylpropionat (Miltitz). $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C. A. 122-74-7

Запах — сладкий, фруктово-цветочный с нотами розы, гиацинта. Жидкость, т. кип. 141–143°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	97	0,996–1,004	20/4	1,490–1,494	>100
Miltitz, 1991	98	0,998–1,004	20/20	1,490–1,494	>100

Получают этерификацией пропионовой кислоты фенилпропиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.128. Фенилпропилизобутират

3-Фенилпропилизобутират, 3-Phenylpropyl isobutyrate (Arc. 2592, RIFM, Hüls), Phenylpropylisobutyrat (Miltitz). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

C. A. 103-58-2

Запах — фруктово-бальзамический, сладкий, освежающий. Жидкость, т. кип. 137°C/20 гПа, 124–126°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты:

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
Hüls, 1990	98	~0,979	20/4	—	136
Miltitz, 1991	98	0,998–1,004	20/20	1,490–1,494	>100

Получают этерификацией изомасляной кислоты фенилпропиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.129. Фенилпропилциннамат

3-Фенилпропилциннамат, 3-Phenylpropyl cinnamate (Arc. 2596, RIFM, GIV). $C_{18}H_{18}O_2$; 266,34

С. А. 122-68-9

Содержится в стираксе, перуанском бальзаме, бензойной смоле.

Запах — бальзамический, стойкий, с цветочной нотой. Жидкость, склонная к полимеризации. В спирте растворяется плохо, растворим в диэтилфталате и бензилбензоате. В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит 98% сложного эфира и имеет d_{25}^{25}1,074 – 1,078; n_D^{20} 1,585–1,588; т. всп. >100°С.

Может быть получен переэтерификацией метилциннамата фенилпропиловым спиртом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.130. 4-Метилбензилацетат

пара-Метилбензилацетат, *пара*-толилкарбинилацетат, *para*-Tolylacetate (Arc. 2956), *para*-Methyl benzyl acetate (IFF). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

С. А. 140-39-6; 2216-45-7

Запах — цветочно-фруктовый, ноты жасмина, персика, банана. Жидкость, т. кип. 222°С/1013 гПа, смесь *пара-* и *орто*-изомеров. В соответствии со спецификацией IFF (1992) содержит 98% (ГЖХ) смеси изомерных эфиров и имеет d_{25}^{25} 1,032–1,040; n_D^{20} 1,500–1,505; т. всп. >100°С. По данным ЕОА, d_{25}^{25}1,030 – 1,035; n_D^{20} 1,502–1,504.

Один из способов получения — хлорметилирование толуола и последующее взаимодействие образующегося хлорида с ацетатом натрия.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках обычно при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.131. Гидратропилацетат

2-Фенилпропилацетат, Hydratropyl acetate (Arc. 1705, IFF), Hydratropic acetate (RIFM). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

С. А. 10402-52-5

Запах — свежий, цветочный, ноты зелени, гиацинта, сирени. Жидкость. Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного ацетата и имеет d_4^{20}1,012 – 1,020; n_D^{20} 1,494–1,498; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией уксусной кислоты гидратроповым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.132. Куминилацетат

4-Изопропилбензилацетат, Cuminyl acetate (Arc. 757, IFF). $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

С. А. 59230-57-8

Содержится в ЭМ *Ledum palustre*.

Запах — свежий, фруктовый, с оттенком запаха бергамота. Жидкость, т. кип. 250°С/1000 гПа; 136°С/22 гПа, смесь п- и о-изомеров.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 1,45 г/кг, derm. LD_{50} > 5 г/кг.

В соответствии со спецификацией IFF (1992) продажный продукт содержит не менее 97% (ГЖХ) смеси изомерных сложных эфиров. При этом массовая доля *орто*-изомера не должна превышать 12%. Продукт имеет d_4^{20}0,993 – 1,003; n_D^{20} 1,494–1,499; т. всп. >100°С.

Может быть получен этерификацией уксусной кислоты куминовым спиртом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначеиия при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.133. Циннамилацетат

3-Фенил-2-пропенилацетат, Cinnamyl acetate (Arc. 626, RIFM, GIV, IFF, BBA, H.+R.). $C_{11}H_{12}O_2$ 176,22

С. А. 103-54-8

Содержится в ЭМ акации и в некоторых других ЭМ.

Запах — цветочно-фруктовый, мягкий. Жидкость, т. кип. 262°С/ 1013 гПа; 139–140°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты:

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	1,047–1,051	25/25	1,540–1,543	>100
IFF, 1992	97	1,049–1,057	20/4	1,539–1,544	>100
H.+R., 1988	98	1,050–1,057	25/25	1,540–1,542	>100
BBA, 1990	98	1,049–1,052	20/20	1,540–1,543	118
РФ, 1990	97	~1,052	20/4	1,538–1,543	—

Получают этерификацией уксусной кислоты коричным спиртом

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.134. Циннамилбутират

3-Фенил-2-пропенилбутират, Cinnamyl butyrate (Arc 629, RIFM, GIV). $C_{13}H_{16}O_2$; 264,33

С.А. 103-61-7

Запах — фруктово-бальзамический, с цветочной нотой. Жидкость, т. кип. 149–150°С/15–16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 98% сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 1,010–1,015; n_D^{20} 1,525–1,528; т. всп. >100°С. В РФ вырабатывается 97%-ный продукт, d_4^{20} 1,010–1,020; n_D^{20} 1,526–1,529.

Получают этерификацией масляной кислоты коричным спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.135. Циннамилциннамат

3-Фенил-2-пропенилциннамат, Cinnamyl cinnamate (Arc. 633, RIFM). $C_{18}H_{16}O_2$; 264,33

С.А. 122-69-0

Содержится в стираксе, перуанском бальзаме, некоторых ЭМ.

Запах — мягкий, бальзамический, стойкий. Кристаллическое вещество, т. пл. 45°С.

Острая токсичность по RIFM (1975) : oral LD_{50}4,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг.

Вырабатываемый в РФ продажный продукт содержит не менее 99% сложного эфира и имеет т. пл. ≥43,5°С.

Получают переэтерификацией этилциннамата коричным спиртом

Используют в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.136. Амилциннамилацетат

2-Бензилиденгептилацетат, Amyl cinnamyl acetate (Arc. 158), Amyl cinnamic acetate (RIFM, IFF). $C_{16}H_{22}O_2$; 246,36

C.A. 7493-78-9

Запах — мягкий, маслянисто-фруктовый, с бальзамической нотой.

Острая токсичность по RIFM (1976) : oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) представляет собой жидкость, содержащую не менее 98% (ГЖХ) сложного эфира, d_4^{20} 0,954–0,962; n_D^{20} 1,487–1,495; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией уксусной кислоты [redacted] амилкоричным спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.137. Стиралилацетат

1-Фенилэтилацетат, метилфенилкарбинилацетат, Methyl phenyl carbinyl acetate (Arc. 2176, RIFM, GIV), Styralylacetate (IFF), Styrolyl acetate (H.+R.), Methylbenzyl acetate (Hüls). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C.A. 93-92-5

Запах — резкий, фруктовый, свежей зелени, нота цветов гардении. Жидкость, т. кип. 214°С/1013 гПа; 92,5°С/13 гПа; 72–73°С/5,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976) : oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >8 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	1,023–1,026	25/25	1,494–1,496	81
IFF, 1992	98	1,023–1,031	20/4	1,492–1,497	90
H.+R., 1988	98	1,023–1,026	25/25	1,493–1,496	98
Hüls, 1990	98	~1,03	20/4	—	~110
РФ, 1990	98	~1,025	20/4	1,493–1,495	92

Получают ацетилированием 1-фенилэтанола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.138. Стиралилпропионат

1-Фенилэтилпропионат, метилфенилкарбинилпропионат, Methyl phenyl carbinyl propionate (Arc. 2186, RIFM), Styralyl propionate (IFF), Styrolyl propionate (H.+R.), Methylbenzyl propionate (Hüls). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C.A. 120-45-6

Запах — фруктово-цветочный, свежей зелени, ноты гардении, жасмина. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1976) : oral LD_{50}5,2 мл/кг (крысы), derm LD_{50} >5 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	98	1,003–1,011	20/4	1,488–1,492	>100
H.+R., 1988	98	1,003–1,008	25/25	1,488–1,492	>100
Hüls, 1990	98	~1,007	20/4	—	106

Получают взаимодействием 1-фенилэтанола с пропионовым ангидридом

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.139. Трихлорметилфенилкарбинилацетат

Трихлорметилбензилацетат, 1-фенил-2,2,2-трихлорэтилацетат, Trichlormethyl phenyl carbinyl acetate (Arc. 2976, RIFM), Rosacetol (GIV), Rose acetate (H.+R.), Rosone (BBA).

$C_{10}H_9O_2Cl_3$;267,54

C.A. 90-17-5

Запах — слабый, цветочный, нота розы, стойкий. Кристаллическое вещество, т. пл. 88°C; т. кип. 280–282°C/1013 гПа; 117°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976) : oral LD_{50} 6,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (%)	Минимальная т. пл.,°C	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	86	>100
H.+R., 1988	98	86	>100
BBA, 1990	97,5	86	>100

Получают действием уксусного ангидрида на трихлорметилфенилкарбинол, который синтезируют из бензальдегида и хлороформа. Возможно получение из диацетата бензальдегида и хлороформа в условиях катализа фазового переноса (Fedoryński M. и др., пат. ПНР 136378, 28.09.82–28.11.86, РЖХ, 1988, 3Р533П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.140. 3-Фенил-3-бутенилацетат

Anisimal (IFF).

$C_{12}H_{14}O_2$; 190,24

C.A. 7306-12-9

Запах — цветочно-бальзамический, с нотой аниса. Жидкость.

Острая токсичность по IFF (1992) : oral LD_{50} 1,69 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией IFF (1992) продажный продукт содержит не менее 90% (ГЖХ) названного сложного эфира и имеет d_4^{20} 1,031–1,039; n_D^{20} 1,521–1,526; т. всп. >100°C.

Может быть получен взаимодействием *альфа*-метилстирола с формальдегидом в среде уксусной кислоты (Červeny L. и др., авт. свид. ЧССР 239403, 23.11.82–16.04.87, РЖХ, 1988, 6Р571П).

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.141. Диметилбензилкарбинилацетат

1,1-Диметил-2-фенилэтилацетат, Dimethyl benzyl carbinyl acetate (Arc. 991, RIFM, GIV, IFF, H.+R.).

$C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C.A. 151-05-3

Запах — сильный, цветочный, ноты розы, жасмина, фруктов. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 30°C; т. кип. 120–124°C/5,3 гПа; 90°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974) : oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >3 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °C	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	29,5	—	—	96
IFF, 1992	97	28	0,996–1,004	1,490–1,495	96
H.+R., 1988	98	29	—	—	111

Получают ацетилированием диметилбензилкарбинола уксусным ангидридом (Л. Я. Брюсова, Е. С. Шувалов, Сб. Синтезы ДВ, Пищепромиздат, М—Л, 1939, с. 185).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.142. Диметилбензилкарбинилпропионат

1,1-Диметил-2-фенилэтилпропионат, Dimethyl benzyl carbinyl propionate (Arc. 995, RIFM, IFF).

$C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

С. А. 67785-77-7

Запах — приятный, цветочно-фруктовый, нота жасмина. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией IFF (1992) продажный продукт содержит не менее 96% (ГЖХ) названного пропионата и имеет d_4^{20} 0,981–0,989; n_D^{20} 1,487–1,492; т. всп. >100°C.

Может быть получен взаимодействием диметилбензилкарбинола с пропионовым ангидридом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

6.143. Диметилбензилкарбинилбутират

1,1-Диметил-2-фенилэтилбутират, Dimethyl benzyl carbinyl butyrate (Arc. 992, RIFM, IFF, H.+R.)

$C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

C.A. 10094-34-5

Запах — травянистый, фруктовый, ноты сливы, абрикоса. Жидкость, т. кип. 96°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1980): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	96	0,968–0,976	20/4	1,483–1,488	>100
H.+R., 1988	98	0,970–0,974	25/25	1,486–1,490	130

Может быть получен взаимодействием диметилбензилкарбинола с масляным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.144. Диметилбензилкарбинилизобутират

1,1-Диметил-2-фенилэтилизобутират, Dimethyl benzyl carbinyl isobutyrate (Arc. 993, IFF)

$C_{14}H_{20}O$; 220.31

C.A. 59354-71-1

Запах – фруктовый, ноты изюма, черной смородины Жидкость

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 96% (ГЖХ) названного изобутирата и имеет d_4^{20} 0,960–0,968; n_D^{20} 1,481–1,485; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией изомасляной кислоты диметилбензилкарбинолом при азеотропной отгонке образующейся воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.145. Диметилфенилэтилкарбинилацетат

1,1-Диметил-3-фенилпропилацетат, Dimethyl phenylethyl carbinyl acetate (Arc. 1044, RIFM, IFF). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

C.A. 103-07-1

Запах — приятный, цветочно-бальзамический.

Жидкость, т. кип. 131°С/23 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50}4,85 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией IFF (1992) продажный продукт содержит не менее 96% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_4^{20} 0,979–0,987; n_D^{20} 1,486–1,491; т. всп. >100°С.

Может быть получен ацетилированием диметилфенилэтилкарбинола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.146. Диметилфенилэтилкарбинилизобутират

1,1-Диметил-3-фенилпропилизобутират, Dimethyl phenylethyl carbinyl isobutyrate (Arc. 1046, IFF). $C_{15}H_{22}O_2$; 234,35

C.A. 10031-71-7

Запах — фруктово-травянистый, ноты папайи, чая. Жидкость, т. кип. 250°С/1013 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% названного сложного эфира и имеет d_4^{20} 0,950–0,958; n_D^{20} 1,477–1,482; т. всп. >100°С.

Может быть получен взаимодействием диметилфенилэтилкарбинола с ангидридом изомасляной кислоты.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.147. Метилэтилфенилэтилкарбинилацетат

1-Метил-1-этил-3-фенилпропилацетат, 3-ацетокси-3-метил-1-фенилпентан, Phenylethyl methyl ethyl carbinyl acetate (Arc. 2542, RIFM, IFF). $C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

C.A. 72007-81-9

Запах — свежий, цветочный, ноты гиацинта, лилии, чая. Жидкость, т. кип. 262°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_4^{20} 0,976–0,984; n_D^{20} 1,487–1,492; т. всп. >100°С.

Получают ацетилированием соответствующего карбинола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.148. Фенилпропенилацетат

2-Фенил-1(2)-пропенилацетат, Bigaflor (Henkel). $C_{11}H_{12}O_2$; 176,22

C.A. 37393-51-6

Запах — цветочный, ноты гиацинта, нероли. Жидкость, т. кип 95°С/2 гПа.

В соответствии со спецификацией Henkel продажный продукт содержит ~95% смеси изомеров ацетата и имеет d_{25}^{25} ~ 1,047; n_D^{20} 1,532 1,535, т. всп. 112°С.

Получают действием на 2-фенил-1,2-пропиленгликоль уксусного ангидрида и небольших количеств серной кислоты (Upadek H. и др., заявка ФРГ 3007232, 27.02.80-10.09.81, РЖХ, 1982, 24Р504П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.149. Гелиотропилацетат

Пиперонилацетат, 3,4-метилендиоксибензилацетат, Heliotropyl acetate (Arc. 1487, IFF), Piperonyl acetate (RIFM). $C_{10}H_{10}O_4$; 194,19

C.A. 326-61-4

Запах — мягкий, цветочный, с фруктовой нотой. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,1 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) гелиотропилацетата и имеет d_4^{20} 1,233-1,241; n_D^{20} 1,524-1,529; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией уксусной кислоты гелиотропиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.150. Фенилгликольдиацетат

Диацетат фенилэтиленгликоля, Phenyl glycol diacetate (Arc. 2566, IFF) Gardeniol I. $C_{12}H_{14}O_4$; 222,24

C A. 6270-03-7

Запах — бальзамический, ноты меда, розы. Жидкость, т. кип. 220°С/1013 гПа.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) диацетата фенилгликоля и имеет d_4^{20} 1,117-1,125; n_D^{20} 1,492-1,497, т. всп. >100°С.

Может быть получен исчерпывающим ацетилированием фенилгликоля, который в свою очередь получается гидратацией оксида стирола

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.151. Метилфенилпентилацетат

1,3,3-Триметил-3-фенилпропилацетат, 4-метил-4-фенил-2-пентилацетат, Vetikolacetat (Dragoco). $C_{14}H_{20}O_2$; 220,31

Запах — травянисто-фруктовый, ноты грейпфрута, ветиверилацетата.

Продажный продукт Dragoco (1989) представляет собой жидкость, содержащую 95% (ГЖХ) названного ацетата и имеющую d_4^{20} 0,978-0,988; n_D^{20} 1,486-1,496; т. всп. >110°С.

Может быть получен алкилированием бензола мезитилоксидом по Фриделю—Крафтсу с последующим селективным гидрированием и ацетилированием.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет.

6.152. Метилбензоат

Methyl benzoate (Arc. 1912, RIFM, GIV, H.+R., Hüls), Methylbenzoat (Miltitz). $C_8H_8O_2$; 136,15

C.A. 93-58-3

Содержится в ЭМ иланг-иланга, туберозы и др.

Запах — сильный, цветочно-фруктовый, ноты иланг-иланга, туберозы, фенола. Жидкость, т. пл. -12°С; т. кип. 199,6°С/1013 гПа, 92°С/27 гПа; P_{20} 0,33 гПа, γ_{20} 39 дин/см, σ_{20} 2,1 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,4 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	1,085–1,088	25/25	1,515–1,518	83
H.+R., 1988	99	1,084–1,088	25/25	1,516–1,518	80
BBA, 1980	98	1,085–1,088	20/20	1,515 1,518	81
Hüls, 1980	99	~1,085	20/4	—	90
Miltitz, 1991	98	1,088–1,092	20/20	1,516-1,518	83

Традиционный метод получения — этерификация бензойной кислоты метанолом. Метилбензоат является побочным продуктом производства диметилового эфира терефталевой кислоты. Возможно выделение продукта парфюмерного качества из такого технического метилбензоата.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 12%. Ограничений IFRA нет.

Служит исходным сырьем для производства некоторых эфиров бензойной кислоты.

6.153. Этилбензоат

Ethyl benzoate (Arc. 1159, RIFM, GIV, H.+R., BBA), Ethylbenzoat (Miltitz). $C_9H_{10}O_2$; 150,18

C.A. 93-89-0

Запах — цветочно-фруктовый, мягче запах метилбензоата. Жидкость, т. кип. 213°С/1013 гПа; 87°С/13 гПа; P_{20} 0,19 гПа; γ_{20} 35,6 дин/см, σ_{20} 2,4 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 6,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 1,9 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	1,043–1,046	25/25	1,503–1,506	88
H.+R., 1988	98	1,043–1,047	25/25	1,504–1,506	97
BBA, 1990	98	1,044–1,047	20/20	1,503–1,506	93
Miltitz, 1992	98	1,043–1,048	20/20	1,503–1,508	84

Обычно получают этерификацией бензойной кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%, а также в некоторых пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.154. Изобутилбензоат

Isobutyl benzoate (Arc. 404, RIFM, GIV, BBA), Isobutylbenzoat (Miltitz). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C.A. 120-50-3

Запах — цветочно-бальзамический, ноты розы, герани. Жидкость, т. кип. 241,5°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	98	0,994–0,997	25/25	1,493–1,1,496	96
BBA, 1990	98	0,996–0,999	20/20	1,493–1,496	102
Miltitz, 1991	98	0,995–1,000	20/20	1,494–1,497	96
РФ, 1990	99	~ 1,000	20/4	1,494–1,495	99

Получают переэтерификацией метилбензоата или этерификацией бензойной кислоты изобутиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.155. Изоамилбензоат

"Amyl benzoate" (Arc. 132, RIFM, GIV, BBA). $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

С. А. 94-46-2

Запах — цветочный, с фруктовой и амбровой нотами. Жидкость, т. кип. 262°С/1013 гПа; 133°С/19 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1973): oral LD_{50} 6,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961	99	0,986-0,990	25/25	1,492-1,495	>100
BBA, 1990	98	0,986-0,990	20/20	1,493-1,496	>100
РФ, 1990	90	~0,992	20/4	1,492-1,495	—

Получают переэтерификацией метилбензоата или этерификацией бензойной кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений. IFRA нет.

6.156. н-Амилбензоат

Пентилбензоат, Pentylbenzoat (Miltitz). $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

С. А. 2049-96-9

Содержится в ягодах черники.

Запах — цветочный, с нотами земли, грибов. Жидкость, т. кип 128-130°С/10,6 гПа.

Продажный продукт Miltitz (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) амилбензоата и имеет d_{20}^{20} 0,990-0,995; n_D^{20} 1,493-1,498; т. всп. >100°С.

Получают переэтерификацией метилбензоата или этерификацией бензойной кислоты н-амиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.157. Гексилбензоат

Hexyl benzoate (Arc. 1642, RIFM, Quest) $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

С. А. 6789-88-4

Запах — древесно-бальзамический, с фруктовой нотой. Жидкость, т. кип. 272°С/1013 гПа; 139-140°С/10,6 гПа; 125°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 12,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 97% (ГЖХ) гексилбензоата и имеет d_{20}^{20} 0,979-0,982; n_D^{20} 1,492-1,494; т. всп. 103°С.

Может быть получен переэтерификацией метилбензоата или этерификацией бензойной кислоты гексиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения, особенно в отдушках для мыла. Ограничений IFRA нет.

6.158. Пренилбензоат

3-Метил-2-бутенилбензоат, Prenyl benzoate (RIFM), Prenylbenzoat (Wacker), Proflora (IFF). $C_{12}H_{14}O_2$; 190,24

С. А. 5205-11-8

Содержится в ЭМ иланг-иланга, нарцисса.

Запах — мягкий, цветочный, с нотами травы, зелени Жидкость, т. кип. 77°С/0,01 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 4,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
Wacker, 1987	98	~1,023	20/20	1,516–1,520	98
IFF, 1992	95	1,019–1,027	25/25	1,516–1,521	>100

Один из способов получения состоит в этерификации бензойной кислоты 3-метил-2-бутенолом (Маяваки Х., Имура Ц., японск. заявка 53-37635, 16.09.76–6.04.78, РЖХ, 1979, 11Р625П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.159 *цис*-3-Гексенилбензоат

cis-3-Hexehyl benzoate (Arc. 1612, RIFM, IFF). $C_{13}H_{16}O_2$; 204,27

C. A. 25152-85-6

Запах — мягкий, травы и свежей зелени, стойкий. Жидкость, т. кип. 256°C/1013 гПа; 130°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит не менее 95% (ГЖХ), *цис*-3-гексенилбензоата и имеет d_4^{20} 0,997–1,005; n_D^{20} 1,505–1,510; т. всп. >100°C.

Может быть получен переэтерификацией метилбензоата или этерификацией бензойной кислоты *цис*-3-гексенолом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках высших сортов при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.160. Этил-3-гидрокси-3-фенилпропионат

Ethyl-3-hydroxy-3-phenylpropionate (Arc. 1272), Labdanax (IFF). $C_{11}H_{14}O_3$; 194,23

C. A. 5764-85-2

Запах — бальзамический, фруктовый, нота лабданума. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 90% (ГЖХ) названного гидроксипропионата и имеет d_4^{20} 1,093–1,101; n_D^{20} 1,507–1,513; т. всп. > 100°C.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA иет.

6.161. Метилциннамат

Methyl cinnamate (Arc. 1949, RIFM, GIV, H.+R., BBA); Methylcinnamat (BASF). $C_{10}H_{10}O_2$; 162,19

C. A. 103-26-4

Содержится в ЭМ различных видов *Alpina* и *Ocimum* и в других ЭМ обычно в *транс*-форме.

Запах — сильный, фруктово-бальзамический, при разбавлении — иота клубиики.

(E)-метилциннамат — кристаллическое вещество, т. пл. 36,5°C; т. кип. 262°C/1013 гПа; 142,5°C/27 гПа; 127°C/13 гПа; d_4^{35} 1,070; n_D^{35} 1,565; $P_{20} 1,47 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,6 г/кг (крысы), derm LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	98	Омыл.	33,8	—	Отсутствие Cl
H +R., 1988	98	Омыл.	33,5	123	
BBA, 1990	98	ГЖХ	34,8	107	
BASF, 1988	98	ГЖХ	—	110	

Получают этерификацией коричной кислоты метанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.162. Этилциннамат

Ethyl cinnamate (Arc. 1188, RIFM, GIV, H.+R., BBA). $C_{11}H_{12}O_2$; 176,22

C. A. 103-36-6

Содержится в клубнике, стираксе и некоторых ЭМ обычно в *транс*-форме.

Запах — сладкий, фруктово-бальзамический. Жидкость, т. кип. 271°C/1013 гПа; 127°C/8 гПа; P_{20}6, 7 · 10^{-3} гПа; γ_{20} 37,3 дин/см; σ_{20} 7,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 7,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,045–1,048	25/25	1,559–1,561	>110
H.+R., 1988	98	1,045–1,048	25/25	1,559–1,561	135
BBA, 1990	98	1,047–1,050	20/20	1,558–1,561	>110
РФ, 1990	99	1,049–1,052	20/4	~1,560	134

Обычно получают этерификацией коричной кислоты этиловым спиртом. Может быть также получен конденсацией бензальдегида с этилацетатом по Кляйзену.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.163. Изобутилциннамат

Isobutyl cinnamate (Arc. 424, RIFM, GIV). $C_{13}H_{16}O_2$, 204,27

C. A. 122-67-8

Запах — фруктово-бальзамический, с травянистой нотой. Жидкость, т. кип. 164–165°C/22 гПа; 146°C/5,3 гПа

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 98% изобутилциннамата и имеет d_{25}^{25} 1,001–1,004; n_D^{20} 1,539–1,541; т. всп. > 100°C.

Получают этерификацией коричной кислоты изобутиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет

6.164. Изоамилциннамат

Isoamyl cinnamate (Arc. 147, RIFM, EOA). $C_{14}H_{18}O_2$; 218.29

C. A. 7779-65-9

Запах — стойкий, бальзамический, нота какао, оттенок запаха лабданума. Жидкость, т. кип. 310°C/1013 гПа, 164°C/5,3 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}
EOA	98	0,992–0,997	1,535–1,539
РФ, 1990	98	~0,994	1,534–1,537

Получают этерификацией коричной кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Бóльшая часть вырабатываемого продукта применяется для производства пищевых ароматических эссен..й. Ограничений IFRA нет

6.165. Метил-4-метилбензоат

Метиловый эфир *пара*-толуиловой кислоты, Methyl-*para*-toluate (Arc. 2246, RIFM), Methyl p-methylbenzoate (Hüls), Cratägin (H.+R.). $C_9H_{10}O_2$; 150,18

С. А. 99-75-2

Запах — сильный, цветочный с нотой аниса, стойкий. Кристаллическое вещество, т. заст. ~37°C; т. кип. 217°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Вырабатываемый Hüls (1990) продажный продукт содержит не менее 99% (ГЖХ) названного эфира и имеет d_4^{20} ~ 1,015, т. заст. 35-37°C; т. всп. 95°C.

Получают этерификацией *пара*-толуиловой кислоты метанолом.

Используют главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

6.166. Диэтилфталат

Диэтиловый эфир фталевой кислоты, Diethyl phtalate (Arc. 913, H.+R., BBA), Neatine (GIV), DEP, Anozol. $C_{12}H_{14}O_4$; 222,24

С. А. 84-66-2

Чистый продукт запаха не имеет, вкус — горький. Жидкость, т. кип. 298°C/1013 гПа; 156°C/14 гПа; σ_{20} 10,1 спуаз.

Острая токсичность, по данным Merck (1992): oral LD_{50} 8,6 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	99	1,115-1,118	25/25	1,499-1,502	138
H.+R., 1988	99	1,115-1,118	25/25	1,501-1,503	166
BBA, 1990	99	1,115-1,119	20/20	1,500-1,505	163
РФ, 1990	99,5	~1,118	20/4	1,500-1,502	137

Получают взаимодействием фталевого ангидрида с этиловым спиртом и небольшим количеством серной кислоты.

Используют в качестве растворителя и для округления запаха в многочисленных парфюмерных композициях и отдушках. Объем производства для использования в парфюмерии и отдушках превышает 5 тыс. т в год. Ограничений IFRA нет.

6.167. Метилсалицилат

Метил-2-гидроксибензоат, Methyl salicylate (Arc. 2241, RIFM, GIV, H.+R.). $C_8H_8O_3$; 152,15

С. А. 119-36-8

Содержится во многих ЭМ и фруктах, в том числе в винтергреневом, иланг-иланговом, акациевом ЭМ.

Запах — специфический, пряный, подобный запаху винтергреневого масла. Жидкость, т. кип. 223°C/1013 гПа; 101°C/16 гПа; γ_{20} 40,3 дин/см; σ_{20} 3,3 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 1,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,180-1,185	1,535-1,538	99
H.+R., 1988	99	1,182-1,184	1,535-1,538	96
РФ, 1990	99,5	~1,183	1,535-1,537	100

Получают этерификацией салициловой кислоты метанолом.

Метилсалицилат широко применяется в отдушках для зубных паст и в малых дозах — в пищевых ароматических эссенциях. Может использоваться в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет. Служит полупродуктом для синтеза других салицилатов методом переэтерификации.

6.168. Метил-2-метоксибензоат

Метиловый эфир метилсалицилата, *ortho*-Methoxy methyl benzoate (Arc. 1877), Methyl o-methoxybenzoate (RIFM, PFW). $C_9H_{10}O_3$; 166,18

C. A. 606-45-1

Запах — травянисто-цветочный, ноты гиацинта, черной смородины. Жидкость, т. кип. 246°C/1013 гПа; 129–130°C/20 гПа; 92°C/1,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral. LD_{50} 3,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией PFW (1983) продажный продукт содержит не менее 98% (ГЖХ) метил-2-метоксибензоата и имеет d_{20}^{20} 1,152–1,158; n_D^{20} 1,532–1,536; т. всп. > 100°C.

Может быть получен метилированием метилсалицилата диметилсульфатом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничеиий IFRA нет.

6.169. Этилсалицилат

Этил-2-гидроксибензоат, Ethyl salicilate (Arc. 1350, RIFM, GIV, H.+R., BBA) $C_9H_{10}O_3$: 166.18

C. A. 118-61-6

Содержится в ежевике, землянике и некоторых ЭМ.

Запах — цветочно-фруктовый, мягкий. Жидкость, т. кип. 231°C/1013 гПа; 107,5–108,5°C/16 гПа; 91°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 1,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	99	1,126–1,129	25/25	1,521–1,523	>100
H.+R., 1988	99	1,126–1,130	25/25	1,521–1,525	100
BBA, 1990	99	1,128–1,131	20/20	1,520–1,523	96
РФ, 1990	99	~1,130	20/4	1,521–1,525	107

Получают этерификацией салициловой кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для зубной пасты, пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.170. Бутилсалицилат

Бутил-2-гидроксибензоат, n-Butyl salicylate (Arc. 529, RIFM), Butyl salicylate (H.+R.) $C_{11}H_{14}O_3$; 194,23

C. A. 2052-14-4

Запах — грубоватый, цветочно-травянистый, ноты клевера, орхидеи. Жидкость, т. кип. 268°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 1,7 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 мл/кг (кролики).

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 98% (омыл.) сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 1,069–1,073; n_D^{20} 1,509–1,513; т. всп. 137°C.

Получают этерификацией салициловой кислоты бутиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.171. Изобутилсалицилат

Изобутил-2-гидроксибензоат, Isobutyl salicylate (Arc. 530, RIFM, GIV, BBA). $C_{11}H_{14}O_3$; 194,23

C. A. 87-19-4

Запах — травянисто-цветочный, ноты клевера, орхидеи. Жидкость, т. кип. 259°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 1,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,061–1,065	25/25	1,507–1,510	>100
BBA, 1990	98	1,065–1,067	20/20	1,508–1,510	121

Получают этерификацией салициловой кислоты изобутанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.172. Изоамилсалицилат

Изоамил-2-гидроксибензоат, Isoamyl salicylate (Arc. 218, H.+R.), "Amyl salicylate" (RIFM, GIV, BBA), Isoamylsalicylat (Miltitz). $C_{12}H_{16}O_3$; 208.26

С. А. 87-20-7

Запах — травянисто-цветочный, пряный, ноты клевера, орхидеи, стойкий. Жидкость т. кип. 270°C/1013 гПа; 151°C/20 гПа; $P_{20}4,0 \cdot 10^{-3}$ гПа; γ_{20} 32,6 дин/см; σ_{20} 5,4 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 0,65 г/кг (собаки); по данным ВНИИСНДВ: oral. LD_{50} 6,7 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	99	омыл.	1,048–1,053	25/25	1,506–1,509	>100
H +R., 1988	98	ГЖХ	1,047–1,050	25/25	1,506–1,508	>100

Продолжение табл.

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
BBA, 1990	98	ГЖХ	1,050–1,054	20/20	1,506–1,508	135
Miltitz, 1991	99	ГЖХ	1,050–1,055	20/20	1,505–1,508	150
РФ, 1990	99,5	омыл.	~ 1,052	20/4	1,506–1,508	129

Получают этерификацией салициловой кислоты изоамиловым спиртом.

Используют во многих парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Дозировка иногда достигает 40%. Ограничений IFRA нет.

6.173. н-Амилсалицилат

Пентил-2-гидроксибензоат, Neotrefol (H.+R.), Amyl salicylate (IFF), Pentyl salicylate (IFF). $C_{12}H_{16}O_3$; 208,26

С. А. 2050-08-0

Запах — цветочно-травянистый, бальзамический. Жидкость, т. заст. ~8°C.

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 98% (омыл.) н-амилсалицилата и имеет d_{25}^{25} 1,051–1,053; n_D^{20} 1,506–1,509; т. всп. >100°C. IFF (1992) вырабатывает смесь нормального и изоамилсалицилата, которая содержит не менее 97% (ГЖХ) суммы изомеров и имеет d_4^{20} 1,049–1,057; n_D^{20} 1,505–1,510; т. всп. > 100°C. Эта смесь содержит 58–70% н-пентилсалицилата и 28–42% изоамилсалицилата.

Под названием "Pentyl salicylat" IFF вырабатывает 97%-ный (ГЖХ) н-пентилсалицилат с d_4^{20} 1,050–1,056; n_D^{20} 1,506–1,512; т. всп. > 100°C.

Получают этерификацией салициловой кислоты амиловым спиртом соответствующей чистоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.174. Гексилсалицилат

Гексил-2-гидроксибензоат, Hexyl salicylate (Arc. 1680, RIFM, BBA), n-Hexyl salicylate (IFF, H.+R.).

$C_{13}H_{18}O_3$; 222,28

C. A. 6259-76-3

Запах — цветочно-пряный, бальзамический, ноты азалеи, зелени, стойкий. Жидкость, т. кип. 167–168°C/16 гПа; 122–125°C/2,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	98	1,033–1,041	20/4	1,502–1,507	>100
H.+R., 1988	99	1,033–1,037	25/25	1,503–1,506	122
BBA, 1990	98	1,035–1,038	20/20	1,504–1,506	146

Получают этерификацией салициловой кислоты гексиловым спиртом или переэтерификацией метилсалицилата.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 15%. Ограничений IFRA нет.

6.175. Пренилсалицилат

3-Метил-2-бутенилсалицилат, Prenyl salicylate (RIFM), Prenylsalicylat (Wacker).

$C_{12}H_{14}O_3$; 206.24

C. A. 68555-58-8

Запах — сильный, цветочный, с травянистой нотой и древесным оттенком. Жидкость, т. кип. 85–87°C/0,01 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 3,2 г/кг (крысы), derm. DL_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~ 96% (ГЖХ) пренилсалицилата и имеет d_{20}^{20} 1,082–1,085; n_D^{20} 1,530–1,533; т. всп. 68°C.

Один из способов получения состоит во взаимодействии твердого салицилата натрия с пренилхлоридом в присутствии тетрабутиламмонийхлорида (Gebauer H., заявка ФРГ 3341607, 17.11.83–3.05.85, РЖХ, 1986, 6Р592П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

6.176. *цис*-3-Гексенилсалицилат

цис-3-Гексенил-2-гидроксибензоат, *cis*-3-Hexenyl salicylate (Arc. 1628, RIFM, IFF, Roure).

$C_{13}H_{16}O_3$; 220 27

C. A. 65405-77-8

Запах — сильный, свежей зелени с бальзамической и жирной нотами, стойкий. Жидкость, т. кип. 145°C/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral. LD_{50} 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Метод определения	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	98	ГЖХ	1,056–1,064	1,518–1,522	>100
Roure	97	Омыл.	~1,064	~ 1,520	158

Получают этерификацией салициловой кислоты или переэтерификацией метилсалицилата *цис*-3-гексенолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках высокого качества при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.177. Циклогексилсалицилат

Циклогексил-2-гидроксибензоат, Cyclohexyl-salicylate (Henkel). $C_{13}H_{16}O_3$; 220,27

Запах – цветочно-бальзамический, стойкий. Жидкость, т. кип. 115°C/0,04 гПа.

В соответствии со спецификацией Henkel продажный продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) циклогексилсалицилата и имеет d_{25}^{25} ~ 1,112; n_D^{20} 1,532–1,536; т. всп. 155°C.

Получают этерификацией салициловой кислоты или переэтерификацией метилсалицилата циклогексанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.178. Фенилуксусная кислота

Phenylacetic acid (Arc. 2492, RIFM, GIV, H +R , BBA). $C_8H_8O_2$; 136,15

C. A. 103-82-2

Содержится в небольшом количестве в ЭМ некоторых видов розы (*Rosa centifolia*, *Rosa rugosa* и др.), китайском мятном и других ЭМ.

Запах — меда, с животной нотой, стойкий. Кристаллическое вещество, т. пл 78°C; т. кип 265,5–266,5°C/1013 гПа; 144,2–144,8°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C	Примечание
GIV, 1961	99	76	—	Сорт "pure"
H.+R., 1988	98	76	>100	—
BBA, 1990	99	76,5–77,5	132	—

Может быть получена взаимодействием хлористого бензила с цианистым натрием с последующим гидролизом бензилцианида.

Используется в микродозах в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.179. Метилфенилацетат

Метиловый эфир фенилуксусной кислоты, Methyl phenylacetate (Arc. 2169, RIFM, GIV, BBA), Phenylacetic acid methyl ester (H.+R.), Methylphenylacetat (Miltitz). $C_9H_{10}O_2$; 150,18

C. A. 101-41-7

Содержится в бобах какао.

Запах — тонкий, медовый, с нотой мускуса. Жидкость, т. кип. 220°C/1013 гПа, γ_{20} 38,2 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,55 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,4 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,062–1,066	25/25	1,505–1,506	90
H.+R., 1988	98	1,062–1,066	25/25	1,506–1,509	95
EOA	98	1,061–1,067	25/25	1,505–1,509	—
BBA, 1990	99	1,065–1,068	20/20	1,506–1,509	98
Miltitz, 1991	99	1,065–1,069	20/20	1,505–1,509	95

62-5414

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты метанолом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.180. Этилфенилацетат

Этиловый эфир фенилуксусной кислоты, Ethyl phenylacetate (Arc. 1332, RIFM, GIV, BBA), Phenylacetic acid ethyl ester (H.+R.), Ethylphenylacetat (Miltitz).

$C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C.A. 101-97-3

Запах — медовый, цветочно-фруктовый. Жидкость, т. кип. 227–228°C/1013 гПа; 120–125°C/22,5 гПа; γ_{20} 35,3 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,3 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,027–1,032	25/25	1,496–1,498	>100
H.+R., 1988	98	1,028–1,032	25/25	1,496–1,499	>100
BBA, 1990	98	1,029–1,033	20/20	1,496–1,500	97
Miltitz, 1991	98	1,030–1,035	20/20	1,497–1,499	101
РФ, 1990	98,5	~1,032	20/4	1,495–1,498	102

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты этиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.181. Бутилфенилацетат

Бутиловый эфир фенилуксусной кислоты, n-Butyl phenylacetate (Arc. 507), Butyl phenylacetate (RIFM, GIV).

$C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C.A. 122-43-0

Запах — бальзамический, медово-цветочный. Жидкость, т. кип. 258°C/1013 гПа; γ_{20} 33,3 дин/см.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 98% бутилфенилацетата и имеет d_{25}^{25} 0,991–0,994; n_D^{20} 1,488–1,491; т. всп. 74°C.

Может быть получен этерификацией фенилуксусной кислоты бутанолом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и в некоторых пищевых эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.182. Изобутилфенилацетат

Изобутиловый эфир фенилуксусной кислоты, Isobutyl phenylacetate (Arc. 510, RIFM, GIV, BBA, IFF), Phenylacetic acid isobutyl ester (H.+R.)

$C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C.A. 102-13-6

Запах — сладкий, ноты меда, шоколада, слабые ноты мускуса, розы. Жидкость, т. кип. 247°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	0,984–0,986	25/25	1,486–1,488	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,984–0,988	25/25	1,485–1,488	>100
BBA, 1990	98 (ГЖХ)	0,985–0,988	20/20	1,486–1,488	116
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	0,982–0,990	25/25	1,484–1,488	>100

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты изобутанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.183. Изоамилфенилацетат

Изоамиловый эфир фенилуксусной кислоты, Isoamyl phenylacetate (Arc. 208, RIFM), "Amyl phenylacetate" (GIV, IFF, BBA). $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

C.A. 102–19–2

Запах — фруктово-бальзамический, сладкий, с нотой шоколада слабым мускусным оттенком. Жидкость, т. кип. 265°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral. LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	0,975–0,977	25/25	1,485–1,487	>100
IFF, 1992	98	0,974–0,982	20/4	1,483–1,488	>100
BBA, 1990	98	0,976–0,979	20/20	1,485–1,487	115

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты изоамиловым спиртом.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках и пищевых ароматических эссенциях при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.184. Этилфенилглицидат

Этиловый эфир 3-фенилэпоксипропионовой кислоты, Ethyl phenylglicidate (Arc. 1339, RIFM, GIV, IFF), Aldehyde C-16 special, so called (H.+R.) $C_{11}H_{12}O_3$; 192,22

C.A. 121–39–1

Запах — сильный, фруктовый, подобный запаху клубники. Жидкость, т. кип. 104°C/0,4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,3 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1961	98 (омыл.)	1,120–1,125	1,516–1,521	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	1,118–1,126	1,517–1,521	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,119–1,127	1,515–1,520	>100

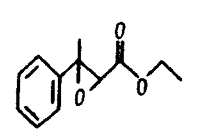
Может быть получен взаимодействием бензальдегида с этиловым эфиром хлоруксусной кислоты или эпоксидированием этилового эфира коричной кислоты надуксусной кислотой.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 2%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.185. Этилметилфенилглицидат

Этиловый эфир 3-метил-3-фенилэпоксипропионовой кислоты, Ethyl methyl phenylglicidate (Arc. 1306, RIFM, IFF), Aldehyde C16, so called (GIV, H.+R), Fraise pure (GIV), Strawberry aldehyde.

$C_{12}H_{14}O_3$; 206,24



C.A. 77-83-8

Запах — сильный, фруктово-клубничный; (Z)-изомер имеет характерный запах земляники (Mosandl A., Zeitschr. Lebensmitt. Untersuch. u. Forsch. 1983, 177, № 1, с. 41, № 2, 129, РЖХ, 1984, 2Р559, 560). Жидкость, т. кип. 153–155°C/24 гПа, смесь (Z)- и (E)-изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 5,5 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98 (омыл.) 95 (ГЖХ)	1,086–1,092	1,503–1,507	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	1,088–1,093	1,504–1,507	>100
IFF, 1992	97 (ГЖХ)	1,088–1,094	1,503–1,507	>100

Может быть получен взаимодействием ацетофенона с этиловым эфиром хлоруксусной кислоты при катализе амидом натрия.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

Входит в состав многих пищевых ароматических эссенций.

6.186–6.215. N-СОДЕРЖАЩИЕ СОЕДИНЕНИЯ

6.186. Метилантранилат

Метил-2-аминобензоат, Methyl anthranilate (Arc. 1910, RIFM, GIV, H.+R., BASF, IFF).

$C_8H_9NO_2$; 151,17

C.A. 134-20-3

Содержится в ЭМ иланг-иланга, туберозы, гардении, плодов цитрусов, цветов апельсина и др.

Запах — характерный фруктовый, с фенольной нотой, при разбавлении — цветов апельсина. Кристаллизующаяся жидкость или кристаллы, т. пл. 25–25,5°C; т. кип. 255°C/1013 гПа; 135°C/20 гПа; 127°C/15 гПа; P_{20} $1,41 \cdot 10^{-2}$ гПа, γ_{20} 43,7 дин/см; σ_{20} 10,4 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °C	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	99	23,8	—	—	>100
H.+R., 1988	99	23,8	1,164–1,168	1,581–1,585	>100
BASF, 1987	99	—	1,161–1,169	1,582–1,584	123
РФ, 1990	99	24,3	—	—	121
IFF, 1992	99	—	1,159–1,168	1,580–1,585	>100

Обычно получают этерификацией антраниловой кислоты метанолом.

Используется в широком ассортименте парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.187. Этилантранилат

Этил-2-аминобензоат, Ethyl anthranilate (Arc. 1154, RIFM, GIV). $C_9H_{11}NO_2$; 165,20

C.A. 87-25-2

Запах — цветов апельсина, более мягкий, чем у метилантранилата. Жидкость, т. заст. 12–13°C; т. кип. 138°C/19 гПа; 118°C/7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 3,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 96% сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 1,115–1,120; n_D^{20} 1,563–1,566; т. всп. 99°C.

Получают этерификацией антраниловой кислоты этиловым спиртом или переэтерификацией метилантранилата в присутствии поташа.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.188. Фенилэтилантранилат

Фенилэтил-2-аминобензоат, Phenylethyl anthranilate (Arc. 2514, RIFM, GIV). $C_{15}H_{15}NO_2$; 241,30

C.A. 133-18-6

Запах — сладко-цветочный, с нотами грейпфрута, меда, травы. Абсолютно чистый продукт, по-видимому, запаха не имеет. Твердое вещество, т. пл. 42–43°C; т. кип. 324°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 98% сложного эфира и имеет минимальную т. пл. 40°C.

Применяется в небольших количествах в цветочных парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

6.189. Метил-N-метилантранилат

Метил-2-метиламинобензоат, метиловый эфир N-метилантраниловой кислоты, Methyl N-methylanthranilate (Arc. 2106), Dimethyl anthranilate (RIFM, GIV), N-Methylanthranilic acid methyl ester (H.+R.). $C_9H_{11}NO_2$; 165,20

C.A. 85-91-6

Содержится в мандариновом, петигреневом (из листьев мандарина), неролиевом и др. ЭМ.

Запах — цветочный, мандариновый. Жидкость, т. пл. 18,5–19,5°C; т. кип. 256°C/1013 гПа; т. кип. 130–131°C/16 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,7 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Минимальное содержание, %		Минимальная т. заст., °C	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп. °C
	(омыл.)	(ГЖХ)				
GIV, 1986	98	90	—	1,126–1,130	1,578–1,581	91
H.+R., рядовой (смесь с метилантранилатом)	98	—	—	1,140–1,144	1,579–1,583	>100
H.+R., 1988, экстра	98	—	18	1,123–1,130	1,578–1,581	>100

Продажный продукт обычно содержит примесь метилантранилата: при т. заст. 18°C — 4%; 14°C — 11%; 12°C — 15%.

Может быть получен взаимодействием метилантранилата с формалином и последующим каталитическим гидрированием (Lerner D. I., пат. США 4633009, 18.06.85–30.12.86, РЖХ, 1987, 23Р495П).

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.190. Основание Шиффа: 2-метилпентаналь-метилантранилат

Метил-N-(2-метилпентилиден)-антранилат, Mevantraal (Quest). $C_{14}H_{20}NO_2$; 234,32

C.A. 50607-64-2

Запах — сладковатый, цветочно-фруктовый, с нотой зелени. Жидкость, т. кип. 165°С/6,7 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985): oral LD_{50} >10 г/кг (крысы).

В соответствии со спецификацией Quest (1989) продажный продукт имеет d_{20}^{20} 1,040–1,044; n_D^{20} 1,581–1,584; т. всп. 138°С.

Получают взаимодействием 2-метилпентаналя с метилантранилатом при кипячении с азеотропной отгонкой воды (Boelens H., пат. США 3974201, 8.03.73–10.08.76, РЖХ 1977, 10Р594П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.191. Основание Шиффа: цитронеллаль-метилантранилат

Метил-N-(3,7-диметил-6-окенилиден)-антранилат, Seringon (Quest), Citronama (IFF). $C_{18}H_{25}NO_2$; 287,41

C.A. 67845-42-5

Запах — стойкий, сладкий, цветочный, с нотами апельсина и цветов апельсина.

Продукт, вырабатываемый Quest (1989), имеет d_{20}^{20} 1,064–1,072; n_D^{20} 1,587–1,593; т. всп. >100°С.

Продукт IFF (1992) имеет d_{25}^{25} 1,004–1,034; n_D^{20} 1,535–1,565; т. всп. >100°С.

Получают взаимодействием цитронеллаля и метилантранилата.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.192. Эврикол

Основание Шиффа: гидроксицитронеллаль-метилантранилат, метил-N-(3,7-диметил-7-гидроксиоктилиден)-антранилат, Hydroxycitronellal- methylanthranilate (Arc. 1735, RIFM), Aurantiol (GIV, BASF, BBA), Aurantesin (H.+R.), Auralva (IFF), Aurantion (Quest), Orantha-l-super (TAK). $C_{18}H_{27}NO_3$; 305,43

C.A. 89-43-0

Запах — сладкий, тяжелый, цветочный, ноты запаха цветов апельсина, липы. Вязкая жидкость, т. кип. ~300°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral. LD_{50} 5 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 10 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	—	—	1,535–1,546	>100	97%-ный по ЭЧ
H.+R., 1988	1,066–1,084	25/25	1,540–1,556	138	
BASF, 1989	0,950–1,100	25/25	1,530–1,550	200	
BBA, 1990	—	—	—	>100	ЭЧ 175–185
Quest, 1989	1,020–1,080	20/20	1,530–1,550	>100	
TAK, 1987	1,052–1,074	25/25	1,540–1,552	145	
РФ, 1991	—	—	1,535–1,546	145	97%-ный по ЭЧ
IFF, 1992	1,049–1,079	25/25	1,535–1,560	>100	

Получают взаимодействием при нагревании в вакууме гидроксицитронеллаля и метилантранилата, часть которых остается в продажном продукте в неизменном виде.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.193. Основание Шиффа: диметилтетрагидробензальдегид-метилантранилат

Метил-N-(диметилтетрагидробензилиден)-антранилат, Vertosine (H.+R.), Ligantraal (Quest).

$C_{17}H_{21}NO_2$; 271,37

C.A. 68738-99-8

Запах — свежей зелени, с оттенком запаха цветов апельсина. Жидкость, т. кип. 170°C/2,7 гПа, смесь изомеров.

Коммерческие продукты

Изготовитель	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
H.+R., 1988	1,080–1,090	25/25	1,599–1,605	144
Quest, 1989	1,080–1,084	20/20	1,600–1,605	170

Получают взаимодействием диметилтетрагидробензальдегида с метилантранилатом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.194. Основание Шиффа: лираль-метилантранилат

Lyrame super C (IFF), Lyrantiol 50% DPG (Quest)

$C_{21}H_{29}NO_3$; 343,47

C.A. 67634-12-2

Запах — сладкий, цветочный, напоминает запах цветов апельсина.

Продажный продукт, вырабатываемый IFF (1992), представляет собой жидкую смесь изомеров, имеющую d_4^{20} ~1,120; n_D^{20} ~1,586; т. всп.>100°C. Lyrantiol 50% (Quest) — раствор этого вещества в дипропиленгликоле — имеет d_{20}^{20} 1,10–1,11; n_D^{20} 1,531–1,539; т. всп. 100°C.

Получают по общей схеме синтеза оснований Шиффа.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.195. Основание Шиффа: бензальдегид-метилантранилат

Метил-N-(бензилиден)-антранилат, Amandelene liquide (Roure).

$C_{15}H_{13}NO_2$; 239,28

Запах – напоминает запах свежего миндаля.

В соответствии со спецификацией Roure (1982) продажный продукт представляет собой жидкость, d_{20}^{20} ~1,136; n_D^{20} ~1,5503; т. всп. 88°C.

Получают взаимодействием бензальдегида с метилантранилатом.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.196. Основание Шиффа: лилиальдегид-метилантранилат

Метил-N-(*пара*-трет.бутил-*альфа*-метил-гидроциннамилиден)-антранилат, Lilial-methylanthranilate (Arc. 1799), Verdantiol (GIV).

$C_{22}H_{27}NO_2$; 337,47

C.A. 91-51-0

Запах — цветов липы, цветов апельсина.

В соответствии со спецификацией GIV (1961) представляет собой вязкую жидкость, n_D^{20} 1,585–1,595; ЭЧ 160–180; т. всп. >100°С.

Получают взаимодействием лилиальальдегида с метилантранилатом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.197. Куминилнитрил

4-Изопропилбензонитрил, Cuminyl nitrile (RIFM), Cumin nitrile (Quest). $C_{10}H_{11}N$; 145,21

С.А. 13816-33-6

Запах — сильный, пряный, с растительной и животной нотами. Жидкость, т. кип. 90°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} 3,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт, вырабатываемый Quest (1989), содержит не менее 95% (ГЖХ) названного нитрила и имеет d_{20}^{20} 0,952–0,958, n_D^{20} 1,517–1,521, т. всп. 98°С.

Получают из куминового альдегида через образование оксима и его дегидратацию.

Используют в парфюмерных композициях, отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 3%. Ограничений IFRA нет.

6.198. Циннамилнитрил

3-Фенилакрилонитрил, бензилиденацетонитрил, Cinnamyl nitrile (Arc. 641, RIFM), Cinnamalva (IFF), Cinnamonitrile (H.+R.). C_9H_7N; 129,17

С.А. 1885-38-7
4360-47-8

Запах — сильный, пряный (корицы), с цветочной нотой. Вязкая жидкость, т. кип. 135–135,5°С/17 гПа. (E)-Циннамилнитрил имеет т. пл. 23,5–24°С.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,15 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
IFF, 1992	96	1,024–1,032	20/4	1,599–1,604	>100
H.+R., 1988	98	1,028–1,032	25/25	1,600–1,603	>100

Может быть получен: конденсацией бензальдегида с ацетонитрилом в присутствии раствора КОН (Runge H.-J., Lücke L., пат. ГДР 208977, 12.05.82–18.04.84; РЖХ, 1985, 7Н164П) или превращением коричного альдегида в оксим и дегидратацией последнего (Saednya A., Synthesis (BRD), 1982, № 3, 190; РЖХ, 1982, 18Ж151).

Используется главным образом в отдушках для мыла, моющих средств и товаров бытовой химии при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

6.199. Цитронитрил

3-Метил-5-фенил-2-пентенил-нитрил, Citronitrile (H.+R.). $C_{12}H_{13}N$; 171,24

Запах — фруктовый, цитрусовый, со слабым цветочно-бальзамическим оттенком, стойкий.

Продажный продукт H.+R. (1988) представляет собой жидкость, содержащую не менее 94% (E)- и (Z)-изомеров названного нитрила, d_{25}^{25} 0,976–0,980; n_D^{20} 1,533–1,536; т. всп. 142°С.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения.

6.200. 2-Бензил-2-метил-3-бутенилнитрил

Citrowanile B (Wacker). $C_{12}H_{13}N$; 171,24

Запах — цитрусовый, с пряно-травянистым оттенком, стойкий. Жидкость, т. кип. 93°C/0,6 гПа.

Продажный продукт Wacker (1987) содержит ~99% названного нитрила и имеет $d_{20}^{20} \sim 0,971$; n_D^{20} 1,513–1,517; т. всп. 108°C.

Получают алкилированием тиглинового альдегида хлористым бензилом в условиях катализа фазового переноса и превращением полученного альдегида в нитрил через соответствующий оксим.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и особенно для отдушек моющих и чистящих средств при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.201. Метилфениламид 2-метилмасляной кислоты

N-Метил-N-фенил-2-метилбутироамид, Gardamide (Quest). $C_{12}H_{17}ON$; 191,28

C.A. 84434-18-4

Запах — очень стойкий, нота запаха стиралилацетата с оттенком ветиверового масла. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 43°C.

Продажный продукт Quest (1989) содержит минимум 98% (ГЖХ) названного амида. Имеет d_{20}^{20} 0,982–0,992; n_D^{20} 1,510–1,513 (переохлажденная жидкость): т. всп. >130°C.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 1–5%. Особенно эффективен для туалетного мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

6.202. Индол

Бензопиррол, Indole (Arc. 1772, RIFM, GIV, H.+R.). C_8H_7N; 177,15

C. A. 120-72-9

Содержится во многих цветочных ЭМ, в том числе в ЭМ жасмина, неролиевом и др.

Запах — очень сильный, фекальный, но при сильном разбавлении — цветочный (жасмина). Кристаллическое вещество, т. пл. 52,6–53,1°C; т. кип. 142–144°C/36 гПа; 128°C/13 гПа; P_{20} $9,3 \cdot 10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

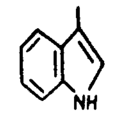
Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
GIV, 1984	99	51	>100
H.+R., 1988	99	51	>100

Индол, пригодный в качестве душистого вещества, обычно получают очисткой технического продукта, которая состоит в вакуум-перегонке и перекристаллизации.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

6.203. Скатол

3-Метилиндол, Skatole (Arc. 2846, RIFM, GIV). C_9H_9N; 131,18



C. A. 83-34-1

Содержится в некоторых ЭМ и в выделениях абиссинской кошки (цибете).

Запах — интенсивный фекальный, при разбавлении — более приятный, животный с оттенком запаха перезрелых фруктов. Кристаллическое вещество, т. пл. 95°C; т. кип. 265–266°C/1001 гПа.

Продажный продукт G'V (1986) содержит не менее 99% (ГЖХ) скатола и имеет минимальную т. пл. 95°C; т. всп. >100°C.

Может быть получен из фенилгидразона пропионового альдегида по Э. Фишеру.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках в микродозах. Ограничений IFRA нет.

6.204. 4-(4,8-Диметил-3,7-нонадиенил)-пиридин

Maritima (IFF). $C_{16}H_{23}N$; 229,37

C. A. 38462-23-6

Запах — сильный, свежести, океанского бриза.

Продажный продукт IFF (1992) представляет собой жидкость, содержащую не менее 90% (ГЖХ) суммы изомеров замещенного пиридина. Он имеет d_4^{20} 0,920–0,928; n_D^{20} 1,513–1,518; т. всп. >100°C.

Получают взаимодействием гидрохлорида мирцена с 4-метилпиридином в присутствии амида натрия (Hall J. B., пат. США 3716543, 28.07.70–13.02.73; РЖХ, 1973, 24Р530П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.205. Хлорфенилпропилпиридин

Root body (H.+R.), Würzelkörper (H.+R.). $C_{14}H_{15}NCl$; 232,74

Запах — сильный, травянистый с оттенками запаха ветиверии, табака. Продажный продукт H.+R. (1988) представляет собой жидкость; d_{25}^{25} 1,089–1,124; n_D^{20} 1,560–1,573; т. всп. 170°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.206. 6-Метилхинолин

пара-Метилхинолин, *para*-Methyl quinoline (Arc. 2238, RIFM, GIV, IFF). $C_{10}H_9N$; 143,19

C. A. 491-35-0

Запах — сильный, животный, с оттенками запаха кожи, бобов тонка. Жидкость, т. кип. 259°C/1013 гПа; 123–124°C/8 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} 1,26 г/кг (крысы), derm. LD_{50} ~ 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	1,063–1,067	25/25	1,612–1,616	>100	Полная растворимость в 10%-ной HCl.
IFF, 1992	97	1,063–1,071	20/4	1,612–1,617	>100	—

Получают взаимодействием *пара*-толуидина с глицерином по реакции Скраупа.

Используют в небольших количествах (дозировка до 2%) в парфюмерных композициях и отдушках, а также для получения тетрагидро-6-метилхинолина. Ограничений IFRA нет.

6.207. Тетрагидро-6-метилхинолин

Тетрагидро-*пара*-метилхинолин, Tetrahydro *пара*-methylquinoline (Arc. 2917, GIV, IFF). $C_{10}H_{13}N$; 147,22

C. A. 91-91-2

Запах — сильный, животный (цибета), с оттенками меда, амбры Кристаллическое вещество, т. пл. 38°C; т. кип. 262°C/950 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1987	98	32	>100	—
IFF, 1992	96	32	>100	Переохлажденная жидкость, n_D^{20} 1,577–1,582

Получают каталитическим гидрированием 6-метилхинолина. Можно также получать восстановлением 6-метилхинолина металлическим цинком в растворе серной кислоты.

Используют в малых дозах (до 2%) в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.208. 6-Втор.бутилхинолин

пара-Втор.бутилхинолин, Isobutyl quinoline (Arc. 524, IFF), sec.-Bntylquinoline (RIFM). $C_{13}H_{15}N$; 185,27

C. A. 65442-31-1

Запах — интенсивный, земли, дегтя, при разбавлении — ноты орехов, дубового мха. Жидкость, т. кип. 155°C/16 гПа.

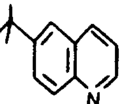
Продажный продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит минимум 80% (ГЖХ) 6-втор. бутилхинолина и не более 20% 8-втор.бутилхинолина и имеет d_4^{20} 1,008 – 1,016; n_D^{20} 1,579–1,584; т. всп. >100°C.

Может быть получен из втор.бутиланилина и акролеина по реакции Скраупа.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках обычно в микродозах.

6.209. 6-Трет.бутилхинолин

пара-Трет.бутилхинолин, *para*-Tert. butyl quinoline (IFF). $C_{13}H_{15}N$; 185,27



C. A. 61702-91-8

Запах — кастореума (бобровой струи), кожи. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 97% (ГЖХ) 6-трет.бутилхинолина и имеет d_4^{20} 1,007–1,017; n_D^{20} 1,579–1,584; т. всп. >100°C.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 1%. Ограничений IFRA нет.

6.210. 2-Изобутилхинолин

Isobutyl quinoline (Arc. 523, GIV). $C_{13}H_{15}N$; 185,27

C. A. 93-19-6

Запах — сильный, кожи, древесный.

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 97% (ГЖХ) 2-изобутилхинолина, d_4^{20} 0,992–0,996; n_D^{20} 1,572–1,576; т. всп. >100°C.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 2%. Ограничений IFRA нет.

6.211. Мускус-ксилол

2,4,6-Тринитро-3,5-диметил-трет.бутилбензол, Musk xylol (Arc. 2282, RIFM, H.+R.), Musk xylene (GIV, BBA). $C_{12}H_{15}O_6N_3$; 297,27

C. A. 81-15-2

Запах — резкий, мускусный. Кристаллическое вещество, существующее в двух формах (I т. пл. 104–106°C, II т. пл. ~ 114°C). После

перекристаллизации обычно т. пл. 114°С. Слабо растворим в спирте (7 г/л в 95%-ном спирте при 25°), лучше в диэтилфталате (170 г/л) и бензилбензоате (280 г/л). Обладает взрывчатыми свойствами.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >10 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 15 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С
GIV, 1986	99	112	>100
H.+R., 1988	99	112	99
BBA, 1990	—	113	168

Получают алкилированием *мета*-ксилола изобутиленом и последующим нитрованием действием смеси серной и азотной кислот.

Используют главным образом в отдушках для мыла и товаров бытовой химии при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.212. Мускус амбровый

2,6-Динитро-3-метокси-4-трет.бутилтолуол, Musk ambrette (Arc. 2278, RIFM, GIV, H.+R.). $C_{12}H_{16}O_5N_2$; 268,28

NO_2 NO_2 OCH_3

С. А. 83-66-9

Запах — сильный, стойкий, мускусный, напоминает запах натурального мускуса. Кристаллы, т. пл. 84,5–85,1°С; P_{20} $0,17 \cdot 10^{-4}$ гПа. Слабо растворим в спирте (26 г/л в 95%-ном спирте при 25°С), лучше — в диэтилфталате (440 г/л) и бензилбензоате (560 г/л).

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 4,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >2 г/кг (кролики).

В период 1979–1984 гг. проведены многочисленные исследования токсичности мускуса амбрового. Установлен фототоксический эффект действия на кожу человека и нейротоксическое действие. С октября 1985 г. IFRA рекомендует не применять этот продукт в парфюмерных композициях и в отдушках для мыла и косметики. Производство мускуса амбрового, достигавшее нескольких сот тонн в год, резко сократилось. В соответствии со спецификацией H.+R. (1988) парфюмерный продукт содержит не менее 99,5% названного соединения и имеет т. пл. 83,5–86°С; т. всп. >100°С.

6.213. Мускус-кетон

3,5-Динитро-2,6-диметил-4-трет. бутилацетофенон, Musk ketone (Arc. 2279, RIFM, GIV, H.+R.). $C_{14}H_{18}O_5N_2$; 294.31

O O_2N NO_2

С. А. 81-14-1

Запах — стойкий, мускусный, пудровый, слабая животная нота. Кристаллическое вещество, т. пл. 137°С, P_{20} $1,3 \cdot 10^{-6}$ гПа. Слабо растворяется в спирте (14 г/л в 95%-ном спирте при 25°С), лучше — в диэтилфталате (160 г/л) и бензилбензоате (280 г/л).

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} > 10 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 10 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С
GIV, 1984	99	135	>100
H.+R., 1988	98	133	135

Получение мускус-кетона в промышленности осуществляют последовательными: алкилированием *мета*-ксилола изобутиленом, ацетилированием образующегося трет. бутил-*мета*-ксилола и нитрованием полученного кетона смесью серной и азотной кислот.

Мускус-кетон используют в большом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек различного назначения при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.214. Мускус-тибетен

1,2,3-Триметил-5 трет.бутил-4,6-динитробензол, Musk tibetene (Arc. 2281, RIFM, GIV). $C_{13}H_{18}O_4N_2$; 266,30

O_2N NO_2

С. А. 145-39-1

Запах — мускусный, пудровый, с цветочным оттенком. Кристаллическое вещество, т. пл. 136,5°С.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 99% (ГЖХ) названного соединения и имеет т. пл. ⩾135°С т. всп.> 100°С.

Применяется при дозировке 1–5% в некоторых парфюмерных композициях в отдушках.

6.215. Мускус-москен

1,1,3,3,5-Пентаметил-4,6-динитроиндан, Moskene (Arc. 2275), 1,1,3,3,5-Pentamethyl-4,6-dinitroindane (RIFM), Musk moskene 100% (GIV). $C_{14}H_{18}O_4N_2$; 278,31

С. А. 116-66-5

Запах — мускусный, сладкий. Кристаллы, т. пл. 133°С.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1984) содержит не менее 98% названного соединения и имеет т. пл.⩾131°С, т.всп. >100°С.

Применяется в некоторых парфюмерных композициях и отдушках (дозировка 1–5%). Ограничений IFRA нет.

6.216 — 6.253. ПРОИЗВОДНЫЕ ФЕНОЛОВ

6.216. Феноксиэтанол

2-Феноксиэтанол, монофениловый эфир этиленгликоля, Ethylene glycol monophehylether (Arc. 1223), Phenoxyethyl alcohol, Arosol (H.+R.), Phenoxyethanol-0 (Hüls). $C_8H_{10}O_2$; 138,17

С. А. 122-99-6

Запах — слабый, с оттенками запаха розы, корицы. Жидкость, т. кип. 245°С/1013 гПа; 117-118°С/13 гПа; 107°С/7 гПа; т. заст. 13°С.

Острая токсичность, по данным Merck (1992): oral LD_{50} 1,26 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Чистота, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
H.+R., 1988	99	1,105–1,108	25/25	1,537–1,540	120	-
Hüls, 1990	91	~1,10	20/4	-	130	-
РФ, 1989	98	~1,108	20/4	1,536–1,538	-	Отсутствие фенола

Обычно получают вакуум-ректификацией технического феноксиэтанола на колоннах эффективностью 10–12 т[illegible]. т. (Л. К. Андреева и др., Пищевая пром-сть, 1992, № 4, с. 24).

Применяют в качестве имеющего слабый запах растворителя в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.217. Феноксиэтилпропионат

2-Феноксиэтилпропионат, Phenoxyethyl propionate (Arc. 2467, IFF, Hüls). $C_{11}H_{14}O_3$ 194,24

С. А. 23495-12-7

Запах — слабый, цветочно-фруктовый. Жидкость, т. заст. 17°С.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 4,4 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 мг/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, 1992	98	1,076–1,084	1,499–1,504	>100
Hüls, 1990	99	~1,079	–	132

Получают этерификацией пропионовой кислоты феноксиэтанолом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.218. Феноксиэтилизобутират

2-Феноксиэтилизобутират, Phenoxyethyl isobutyrate (Arc. 2466, RIFM, GIV, IFF, Quest), Phenoxyethylisobutyrat (Miltitz), Phenirat (H.+R.)

$C_{12}H_{16}O_3$; 208,26

C. A. 103-60-6

Запах — фруктово-цветочный, с нотой розы, оттенки запаха зелени, ананаса, грейпфрута. Жидкость, т. кип. 265°C/1013 гПа; 125–127°C/5,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальная чистота (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	97	1,045–1,049	20/4	1,492–1,495	>100
H.+R., 1988	98	1,044–1,050	25/25	1,492–1,496	>100
IFF, 1992	98	1,042–1,048	20/4	1,492–1,496	>100
Quest, 1989	98	~1,046	20/20	~1,494	>60
Hüls, 1990	99	~1,048	20/4	–	148
Miltitz, 1990	98	1,047–1,050	20/20	1,492–1,496	>100
РФ, 1990	98	~1,045	20/4	1,491–1,496	128

Получают этерификацией изомасляной кислоты феноксиэтанолом (Л. Г. Деркач и др., Масло-жировая пром-сть, 1977, № 8, с. 28).

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

6.219. Аллилфеноксиацетат

Аллиловый эфир феноксиуксусной кислоты, Allyl phenoxyacetat (Arc. 91, RIFM, H.+R., BBA), Acetate PA (GIV).

$C_{11}H_{12}O_3$; 192,22

C. A. 7493-74-5

Запах — резкий, фруктовый (ананаса), с медовым оттенком. Жидкость, т. кип. ~265°C/1013 гПа; 100–102°C/1,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 0,48 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} 0,82 мл/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1986	97	1,100–1,105	25/25	1,513–1,518	>100
H.+R., 1988	98	1,100–1,105	25/25	1,514–1,517	>100
BBA, 1990	98	1,103–1,106	20/20	1,514–1,517	>100

Получают этерификацией феноксиуксусной кислоты аллиловым спиртом.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках в дозах до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. IFRA не рекомендует применять в парфюмерных композициях продукт, содержащий более 0,1% аллилового спирта.

6.220. Метиловый эфир *пара*-крезола

пара-Метокситолуол, p-Gresyl methyl ether (Arc. 719, RIFM, H.+R., BASF., BBA, Quest), Methyl *para*-Cresol (GIV). $C_8H_{10}O$; 122,17

C. A. 104-93-8

Входит в состав иланг-илангового и других ЭМ.

Запах резкий, пряный, напоминает запах кожи, иланг-илангового масла. Жидкость, т. кип. 175°C/1013 гПа, 51°C/4 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

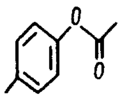
Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ),%	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961, EOA	-	0,966–0,969	25/25	1,510–1,513	66	п-крезол <1%
H.+R., 1988	99	0,967–0,970	25/25	1,510–1,513	67	
BASF, 1987	99	0,966–0,970	25/25	1,510–1,513	58	
BBA, 1990	98	0,968–0,971	20/20	1,510–1,513	62	п-крезол <0,5%
Quest, 1989	98	~0,967	20/20	~1,515	62	
РФ, 1990	-	~0,970	20/4	~1,512	60	

Получают метилированием *пара*-крезола диметилсульфатом или натровой солью метилсерной кислоты.

Используют в небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет. Технический продукт является исходным сырьем для производства анисового альдегида.

6.221. *пара*-Крезилацетат

4-Метилфенилацетат, p-Cresyl acetate (Arc. 725, RIFM, GIV $C_9H_{10}O_2$; 150,18



C. A. 140-39-6

Содержится в иланг-иланговом и других ЭМ.

Запах — сильный, животный, при разбавлении—цветочный (нарцисса). Жидкость, т. кип. 209°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 2,1 г/кг (кролики). Продажный продукт, вырабатываемый GIV (1984), содержит минимум 99% (ГЖХ) *пара*-крезилацетата и имеет d_4^{20} 1,046–1,051; n_D^{20} 1,499–1,502; т. всп. 95°C.

В РФ выпускается 99%-ный *пара*-крезилацетат, n_D^{20}1,500–1,502.

Получают ацетилированием *пара*-крезола уксусным ангидридом.

Используется в очень небольших дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.222. *пара*-Крезилизобутират

4-Метилфенилизобутират, p-Gresyl isobutyrate (Arc. 729, RIFM, GIV, IFF). $C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

C. A. 103-93-5

Запах — сильный, животный, при разбавлении — ноты нарцисса, сирени. Жидкость, т. кип. 234–239°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 4 г/кг (крысы), derm LD_{50} 4 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1961, EOA	95	0,991–0,996	25/25	1,486–1,489	>100
IFF, 1992	97	0,990–0,998	20/4	1,484–1,489	>100

Используется в малых дозах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.223. *пара*-Крезилкапронат

4-Метилфенилгексаноат, p-Cresyl caproate. $C_{13}H_{18}O_2$; 206,28

Запах — цветочный (нарцисса), с оттенком запаха иланг-иланга. Жидкость, т. кип. 268–270°С/1013 гПа; 142–143°С/19 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ, содержит минимум 95% *пара*-крезилкапроната и имеет кислотное число <4 и n_D^{20} 1,488–1,491.

Получают этерификацией капроновой кислоты *пара*-крезолом при азеотропном удалении реакционной воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

6.224. *пара*-Крезилкаприлат

4-Метилфенилоктаноат, p-Cresyl caprylate (Arc. 730, RIFM, IFF). $C_{15}O_{22}O_2$; 234,34

C. A. 59558-23-5

Запах — цветочный (нарцисса), с индольной нотой. Жидкость, т.кип. 265°С/1013 гПа; 175°С/2,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 1,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт, вырабатываемый IFF (1992), содержит минимум 97% (ГЖХ) *пара*-крезилкаприлата и имеет d_4^{20} 0,955–0,963; n_D^{20} 1,483–1,487; т. всп. >100°С.

Может быть получен этерификацией каприловой кислоты п-крезолом при одновременной отгонке образующейся воды.

Применяется при производстве парфюмерных композиций и отдушек в дозах до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.225. *пара*-Крезилфенилацетат

пара-Крезиловый эфир фенилуксусной кислоты, p-Cresyl phenylacetate (Arc. 739, RIFM, GIV). $C_{15}H_{14}O_2$; 226,28

C. A. 101-94-0

Запах — медово-цветочный, с животной нотой. Кристаллическое вещество, т. пл. 75–76°С, т. кип. 190–195°С/7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} >5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продажный продукт, вырабатываемый GIV (1984), содержит минимально 99% (ГЖХ) *пара*-крезилфенилацетата и имеет т. пл. ≥73,5°С, т. всп. >100°С.

Получают этерификацией фенилуксусной кислоты *пара*-крезолом при отгонке реакционной воды.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.226. Тимол

2-Изопропил-5-метилфенол, Thymol (Arc. 2944, GIV, H.+R.). $C_{10}H_{14}O$; 150,22

C. A. 89-83-8

Содержится в ажгоновом (*Carum ajowan B. H.*) и других ЭМ.

Запах — своеобразный, пряно-травянистый с "медицинским" оттенком. Кристаллы, т. пл. 51,5°C, т. кип. 232,5°C/1013 гПа. Обладает бактерицидным действием.

Острая токсичность по Merck (1992): oral LD_{50}0,98 г/кг (крысы).

Синтетический тимол, вырабатываемый H.+R. (1988), содержит минимум 99% (ГЖХ) названного продукта, т. пл. 50–51°C; т. всп. 116°C.

В РФ выпускается синтетический 99%-ный (ГЖХ) тимол с т. пл. 49–51°C и т. всп. 102°C.

Производство тимола осуществляют орто-алкилированием *мета*-крезола пропиленом под давлением при катализе крезолятом алюминия, причем процесс может быть непрерывным (H.+R.) (Biedermann W. и др., заявка ФРГ 2528303, 25.06.75–30.12.76, РЖХ, 1977, 22Н103П) или периодическим (РФ) (Хейфиц Л. А. и др., Авт. свид. 212270, 9.11.66–1.07.71). Выделение чистого тимола выполняется вакуум-ректификацией.

Тимол в больших количествах используется для производства синтетического ментола. Имеет ограниченное применение в отдушках для мыла и зубных паст.

6.227. Анисовый спирт

4-Метоксибензиловый спирт, Anisyl alcohol (Arc. 249, RIFM, GIV, H.+R.), Anisic alcohol (IFF), Anise alcohol (BASF).

$C_8H_{10}O_2$; 138,17

C. A. 105–13–5

Содержится в ЭМ ванили, некоторых сортов аниса и др.

Запах — цветочно-травянистый с нотами аниса, боярышника. Жидкость, склонная к кристаллизации, т. пл. 24–25°C; т. кип. 259°C/1013 гПа; 136°C/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,2 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,0 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание,%	Минимальная т. заст., °C	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	23,5	–	–	–	>100
H.+R., 1988	98	24	1,110–1,114	25/25	1,543–1,546	>100
IFF, 1992	97	23	1,109–1,117	20/4	1,542–1,546	137
BASF, 1987	97	–	1,110–1,115	25/25	–	146

Обычно получают каталитическим гидрированием анисового альдегида.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

Является исходным продуктом для получения анисилацетата.

6.228. Анисилацетат

4-Метоксибензилацетат, Anisyl acetate (Arc. 247, GIV, IFF, H.+R.).

$C_{10}H_{12}O_3$; 180,21

C. A. 104–21–2

Содержится в ЭМ *Causalis antriscus.*

Запах — фруктовый, бальзамический, цветочный, с нотой малины. Жидкость, т. кип. 270°C/1013 гПа; 133°C/15 гПа; 120°C/6,6 гПа; γ_{20}25,5 дин/см.

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 2,25 г/кг, derm. LD_{50} >5 г/кг.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1984	98	1,105–1,109	20/4	1,511–1,515	>100
IFF, 1992	97	1,104–1,112	20/4	1,511–1,515	>100
H.+R., 1988	98	1,105–1,107	25/25	1,512–1,514	>100
РФ, 1990	97	~1,108	20/4	1,512–1,518	–

Получают этерификацией уксусной кислоты анисовым спиртом.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 0,5–5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.229. Анетол

4-Метокси-1-пропенилбензол, Anethole (Arc. 236, RIFM, IFF, BBA). Anethol (H.+R.)

$C_{10}H_{12}O$; 148,21

CH_3O

С. А. 104–46–1; 4180–23–8

Содержится в ЭМ аниса, фенхеля, бадьяна и др. Преимущественно в *транс*-форме.

Запах — сладкий, анисовый.

(E)-Анетол — кристаллы, т. пл. 23°С; т. кип. 234°С/1017 гПа; 115°С/16 гПа; 81–81,5°С/3 гПа, $P_{20}1,2 \cdot 10^{-2}$ гПа.

(Z)-Анетол — жидкость, т. заст. -22,5°С; т. кип. 79–79,5°С/3 гПа; $P_{20}4,3 \cdot 10^{-2}$ гПа.

(E)-Анетол (*транс*-анетол) разрешено использовать в пищевых эссенциях (GRAS — FEMA № 2086). (Z)-Анетол (*цис*-анетол) более токсичен.

Острая токсичность (E)-анетола по RIFM (1973): oral LD_{50}2,09 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Состав,%		$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Минимальная т.заст., °С	Т. всп., °С
	минимум (E)	максимум (Z)					
BBA, 1990, Anethole USP	99	0,3	0,983–0,989	20/20	1,558–1,561	20,5	92
BBA, 1990, Anethole natur.	99	–	0,983–0,989	20/20	1,558–1,561	21	92
BBA, 1990, Anethole 21/22°C	99	–	0,983–0,989	20/20	1,558–1,561	20	92
H.+R., 1988, Anetnol 21/22°C	99	0,15	0,985–0,988	25/25	1,559–1,561	21,5	92
РФ, 1990	96	0,3	~0,986	20/4	1,557–1,562	–	102
IFF, 1992	99	0,5	0,983–0,990	25/25	1,557–1,562	–	>100

Традиционные методы получения анетола путем выделения из анисового, бадьянового или фенхельного масла практически потеряли свое значение из-за дороговизны этих масел.

В США действует крупное производство анетола из высших фракций американского сульфатного скипидара. Из кариофилленово-анетольной фракции (0,5% от массы скипидара) анетол выделяют вымораживанием. Другую фракцию (1% от массы скипидара), содержащую эстрагол и *альфа*-терпинеол, обрабатывают едким кали. Эстрагол при этом изомеризуется в анетол, который выделяют из смеси вакуум-ректификацией.

В РФ действует разработанный ВНИИСНДВ метод синтеза анетола путем последовательных: ацилирования анизола пропионовым ангидридом, каталитического восстановления *пара*-метоксипропиофенона до соответствующего вторичного спирта, дегидратации последнего и выделения анетола вакуум-ректификацией (Г. Э. Свадковская и др., Авт. свид. 261380, 8.08.68–13.01.70, Масло-жировая пром-сть, 1974, № 12, с. 24).

Аналогичным способом осуществляется крупное производство анетола в Германии (H.+R.).

Анетол в небольших количествах используется в парфюмерных

композициях. Основная масса расходуется для производства пищевых ароматических эссенций и отдушек для зубных паст. Ограничений IFRA нет.

6.230. Эстрагол

пара-Аллиланизол, метилхавикол, Estragol (Arc. 1131, GIV), Methyl chavicol (RIFM).

$C_{10}H_{12}O$; 148,21

С. А. 140-67-0

Содержится в скипидаре, в ЭМ различных сортов базилика и в ЭМ эстрагона.

Запах резкий, анисовый, травянистый. Жидкость, т. кип. 217°С/1013 гПа; 97–97,5°С/16 гПа; 86°С/9,3 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 1,8 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

Продукт, вырабатываемый GIV (1984), содержит не менее 98% эстрагола и имеет d_4^{20} 0,962–0,969; n_D^{20} 1,519–1,523; т. всп. 80°С.

Эстрагол может быть получен выделением из эстрагольно-терпинеольной фракции сульфатного скипидара (см., например, Бардышев И. И., Перцовская А. Л., авт. свид. 350779, 4.12.70–20.09.72, РЖХ, 1973, 16Р400П).

Используется в сравнительно небольших количествах (ввод — до 2%) в парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет. Может быть использован в пищевых ароматических эссенциях. Служит исходным продуктом для получения анетола щелочной изомеризацией.

6.231. Дигидроанетол

пара-Пропиланизол, Dihydro anethole (Arc. 924, RIFM, GIV).

$C_{10}H_{14}O$; 150,24

С. А. 104-45-0

Запах — родственный запаху лакрицы, анетола, с древесной нотой. Жидкость, т. кип. 57°С/2 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 4,4 г/кг (крысы), derm LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) парфюмерный продукт содержит ~99% (ГЖХ) дигидроанетола и имеет d_{25}^{25} 0,940–0,943, n_D^{20} 1,503–1,506; т. всп. 85°С.

Может быть получен каталитическим гидрированием анетола.

Рекомендуется для применения в отдушках для мыла и синтетических моющих средств. Ограничений IFRA нет.

6.232. Метиланисат

Метил-4-метоксибензоат, Methyl anisate (Arc. 1908, RIFM, GIV).

$C_9H_{10}O_3$; 166,18

С. А. 121-98-2

Запах — травянистый, с цветочными нотами. Кристаллы, т. пл. 48°С; т. кип. 256°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продукт содержит минимум 98% сложного эфира и имеет минимальную т. заст. 47,5°С.

Получают этерификацией анисовой кислоты метанолом.

Применяют главным образом при создании цветочных парфюмерных композиций. Ограничений IFRA нет.

6.233. Этиланисат

Этил-4-метоксибензоат, Ethyl anisate (Arc. 1153, RIFM, GIV).

$C_{10}H_{12}O_3$; 180,21

С. А. 94-30-4

Запах — нежный, цветочно-анисовый. Жидкость, т. кип. 269–270°С/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} 2,04 мл/кг (крысы), derm. LD_{50} >5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продукт содержит минимум 97% сложного эфира и имеет d_{25}^{25} 1,101–1,104; n_D^{20} 1,522–1,526; т. всп. >100°С.

Получают этерификацией анисовой кислоты этиловым спиртом.

Применяют при создании парфюмерных композиций и пищевых ароматических эссенций. Ограничений IFRA нет.

6.234. *пара*-Трет.бутиланизол

1-Метокси-4-трет.бутилбензол, Equinol (Quest). $C_{11}H_{16}O$; 164,25

CH₃O

С. А. 5396-38-3

Запах — кожи, с древесным и животным оттенками. Продажный продукт Quest (1989) представляет собой жидкость, d_{20}^{20} ~0,937; n_D^{20} ~1,503; т. всп. 89°С.

Может быть получен алкилированием анизола изобутиленом или взаимодействием *пара*-трет.бутилфенола с метанолом в присутствии катализаторов.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.235. *орто*-Этоксиметиланизол

Этиловый эфир 2-метоксибензилового спирта, Corps eglantine (Dragoco). $C_{10}H_{14}O_2$; 166,22

OCH₃ O

С. А. 64988-06-3

Запах — зелени, с нотой розы. Продажный продукт Dragoco представляет собой жидкость, содержащую не менее 95% (ГЖХ) *орто*-этоксиметиланизола, d_4^{20} 1,011 – 1,019; n_D^{20} 1,505-1,510; т. всп. 91°С.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.236. Диметиловый эфир гидрохинона

1,4-Диметоксибензол, диметилгидрохинон, Hydroquinone dimethylether (Arc. 1719), Dimethylhydroquinone (RIFM, GIV). $C_8H_{10}O_2$; 138,17

OCH₃ CH₃O

С. А. 150-78-7

Содержится в ЭМ гиацинта.

Запах — мягкий, травы, свежескошенного сена. Кристаллический продукт, т. пл. 56°С, т. кип. 212,6°С/1013 гПа; 109°С/27 гПа; d_4^{66} 1,036.

Острая токсичность, по данным Merck (1992): oral LD_{50} 3,6 г/кг (крысы).

Продажный продукт GIV (1984) содержит минимум 99% (ГЖХ) диэфира и имеет минимальную т. пл. 53°С, т. всп. >100°С. Получают метилированием гидрохинона диметилсульфатом или натриевой солью метилсерной кислоты.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке 0,1–5%. Ограничений IFRA нет.

6.237. 1,4-Диметокси-2-трет.бутилбензол

Диметиловый эфир 2-трет.бутилгидрохинона, Vetylbois (Roure). $C_{12}H_{18}O_2$; 194.27

OCH₃ CH₃O

Запах — древесный, с нотами зелени, пачулиевого и ветиверового ЭМ.

Продажный продукт Roure (1990) содержит минимум 98% (ГЖХ) диэфира и имеет d_{20}^{20} 0,995 – 0,999; n_D^{20} 1,508-1,512; т. всп. 116°С. Острая токсичность, по данным Roure: oral LD_{50} >5 г/кг.

Возможный путь синтеза — алкилирование диметилового эфира гидрохинона изобутиленом.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.238. Диметиловый эфир резорцина

1,3-Диметоксибензол, диметилрезорцин, Resorcinol dimethylether (Arc. 2796), Resorcin dimethyl ether (H. + R.). $C_8H_{10}O_2$; 138,17

CH₃O OCH₃

С. А. 151-10-0

Запах — сильный, землистый, лесных орехов. Жидкость, т. кип. 215°С/1013 гПа.

Продажный продукт H. + R. (1988) содержит минимум 96% (ГЖХ) диэфира и имеет d_{25}^{25} 1,064 – 1,068; n_D^{20} 1,522 -1,527; т. всп. >100°С.

Получают метилированием резорцина диметилсульфатом или натровой солью метилсерной кислоты.

Используют в небольших количествах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.239. Монометиловый эфир орсина

3-Гидрокси-5-метиланизол, Orcinyl 3 (Roure). $C_8H_{10}O_2$; 138,17

Содержится в резиноиде дубового мха.

Запах — резиноида дубового мха, со смолистой и фруктовой нотами, стойкий. Порошок, т. пл. 61–62°С; т. кип. 259°С/1004 гПа; 130°С/9 гПа.

Продажный продукт Roure (1983) имеет т. пл. ~61°С; кисл. число ~6.

Используют в парфюмерных композициях при дозировке 1–3% обычно вместе с фисцианином при соотношении эфир орсина : фисцианин 25:75. Такое сочетание дает имитацию натурального дубового мха. Ограничений IFRA нет.

6.240. Фисцианин

Метиловый эфир 2,4-дигидрокси-3,6-диметилбензойной кислоты, эверинл, Veramoss (IFF), Evernil (Roure), Oakmoss № 1 (TAK). $C_{10}H_{12}O_4$; 196,21

C. A. 4707-47-5

Содержится в резиноиде дубового мха (*Evernia prunastri*).

Запах — древесный, дубового мха, стойкий. Кристаллическое вещество, т. пл. 145°С.

Острая токсичность, по данным TAK (1987): oral LD_{50} 3,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Oakmoss № 1, вырабатываемый TAK (1987), содержит не менее 95% (ГЖХ) фисцианина и имеет т. пл. 143°С; т. всп. >130°С.

В спецификации на Evernil (Roure) указана лишь т. пл. 144°С.

Veramoss (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) фисцианина и имеет т. пл. ≥139°С.

Veramoss SPS (1992) представляет собой 20%-ный раствор фисцианина в метилкарбитоле. Этот раствор имеет d_4^{20} 1,068 – 1,076; n_D^{20} 1,456–1,462; т. всп. 89°С.

Имеется несколько путей синтеза фисцианина, но все они не выходят пока за рамки масштабов малого производства.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.241. Аллиловый эфир гваякола

Аллилгваяциловый эфир, 2-аллилоксианизол, Guaiacol allylether (Arc. 1473), Dianthox (H. + R.). $C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

C. A. 4125-43-3

Запах — резкий, древесный, "дымный", с нотами перца, гвоздики. Жидкость, т. кип. 111–113°С/15 гПа; n_D^{22} 1,534.

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит минимально 90% (ГЖХ) названного вещества и имеет d_{25}^{25} 1,042–1,055; n_D^{20} 1,530–1,535; т. всп. 106°С.

Может быть получен взаимодействием гваяколята натрия с хлористым аллилом.

Применяется в небольших количествах в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.242. Аллиловый эфир гуэтола

1-Аллилокси-2-этоксибензол, Carnothene (Dragoco). $C_{11}H_{14}O_2$: 178,23

C. A. 94-86-0

Запах — пряный, с нотой запаха гваякового дерева. Продажный продукт Dragoco (1990) представляет собой жидкость, содержит минимум 95% (ГЖХ) аллилового эфира гуэтола и имеет d_4^{20} 1,019 – 1,029; n_D^{20} 1,519–1,525.

Может быть получен взаимодействием гуэтолята натрия с хлористым аллилом.

Применяется при дозировке 2–5% в парфюмерных композициях и отдушках. Может использоваться для частичной замены изоэвгенола, введение которого в парфюмерные композиции ограничивается IFRA пределом 1%. Ограничений IFRA на применение аллилового эфира гуэтола нет. Продукт не должен содержать более 0,1% свободного аллилового спирта.

6.243. Эвгенол

2-Метокси-4-аллилфенол, Eugenol (Arc. 1369, RIFM, GIV, H.+R., IFF, BBA).

$C_{10}H_{12}O_2$; 164,21

HO, OCH₃

C. A. 97–53–0

Входит в состав гвоздичного, эвгенольно-базиликового (*Ocimum gratissimum*), коричного и многих других ЭМ.

Запах — сильный, пряный, гвоздичный. Жидкость, т. заст. −10,4°C; т. кип. 253°C/1013 гПа; 118°C/13 гПа; 110°C/7 гПа; P_{20} $1{,}18 \cdot 10^{-2}$ гПа; γ_{20} 35,5 дин/см; σ_{20} 8,9 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,68 г/кг (крысы).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1987	99	1,065–1,069	20/4	1,539–1,542	>100
H.+R., 1988	98	1,063–1,069	25/25	1,539–1,542	110
BBA, 1990	—	1,064–1,068	20/20	1,540–1,542	113
РФ, 1990	99	1,067–1,068	20/4	1,540–1,542	110
Miltitz, 1990	99	1,065–1,071	20/20	1,540–1,542	110
IFF, 1992	98	1,061–1,069	20/4	1,537–1,542	>100

Основным промышленным методом получения эвгенола является выделение из эфирных масел. Эвгенол хорошего парфюмерного качества получается при щелочной обработке гвоздичного или эвгенольно-базиликового ЭМ, экстракции примесей органическим растворителем и при обратном превращении эвгенолята в эвгенол.

Способы синтеза эвгенола перегруппировкой аллилового эфира гваякола или непосредственным каталитическим аллилированием гваякола (Брюсова Л. Я., Иоффе М. Л., Журн. общ. хим., 1941, 11, № 9, с. 722; Шилина Р. Ф. и др., авт. свид. 352872, 22.01.71–12.10.73, РЖХ 1973, 22Р501П; De Simone R. S., Ramsden H. E., пат. США 3929904, 16.08.74–30.12.75, РЖХ, 1976, 19Р485П) весьма несовершенны.

Применяется в парфюмерных композициях (дозировка — до 20%), отдушках различного назначения и пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

6.244. Метиловый эфир эвгенола

3,4-Диметоксиаллилбензол, Methyl eugenol (Arc. 2026, RIFM, GIV, IFF), Eugenyl methyl ether (H. + R.), Eugenolmethylether (Miltitz).

$C_{11}H_{14}O_2$; 178,23

CH₃O, OCH₃

C. A. 93–15–2

Содержится в цейлонском цитронелловом, иланг-иланговом, сасафрассовом, розовом и других ЭМ.

Запах — мягкий, пряный, гвоздичный. Жидкость, т. кип. 244°C/1013 гПа; 127–129°C/15 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 1,56 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	1,032–1,035	25/25	1,532–1,536	115	Содержание эвгенола <1%
H.+R., 1988	98	1,032–1,035	25/25	1,532–1,535	>100	
Miltitz, 1991	98	1,035–1,040	20/20	1,532–1,536	117	
IFF, 1992	98	1,030–1,038	25/25	1,531–1,536	>100	

Получают метилированием эвгенола диметилсульфатом или натровой солью метилсерной кислоты.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках обычно при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.245. Эвгенилацетат

4-Ацетокси-3-метоксиаллилбензол, Aceteugenol (Arc. 14), Eugenyl acetate (RIFM, IFF), Eugenol acetate (GIV) — $C_{12}O_{14}O_3$; 206,24

C. A. 93-28-7

Содержится в ЭМ гвоздики.

Запах — мягкий, гвоздичный, с фруктовым оттенком. Жидкость, кристаллизующаяся при комнатной температуре, т. пл. 29°C; т. кип. 281–282°C/1000 гПа; 145–146°C/11 гПа; γ_{20} 31 дин/см, σ_{20} 21,5 спуаз.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 2,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание, %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °C	Т. всп., °C
GIV, 1961	98	1,077–1,082	—	25	>100
IFF, 1992	98	1,075–1,083	1,516–1,520	—	>100

Получают ацетилированием эвгенола действием уксусного ангидрида.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10% Ограничений IFRA нет.

6.246. Дигидроэвгенилацетат

1-Ацетокси-2-метокси-4-пропилбензол, Dihydroeugenyl acetate. — $C_{12}H_{16}O_3$; 208,26

Запах — специфический, с нотой гвоздики. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 19°C; т. кип. 155°C/23 гПа; 149–150°C/19 гПа; 115°C/2,7 гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 99% сложного эфира и имеет $d_4^{20} \sim 1,057; n_D^{20}$ 1,503–1,506.

Получают действием уксусного ангидрида на дигидроэвгенол.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.247. Изоэвгенол

4-Гидрокси-3-метокси-1-пропенилбензол, Isoeugenol (Arc. 1370, RIFM, GIV, H. + R., IFF, BBA). — $C_{10}H_{12}O_2$; 164,22

C. A. 97-54-1

Содержится в иланг-иланговом, индийском аирном и других ЭМ.

Запах — цветочный, пряный, гвоздичный.

Существует в виде двух изомеров. (E)-изомер, т. пл. 33–34°C; т. кип. 140°C/16 гПа; 118°C/6,7 гПа; $P_{20} 4,3 \cdot 10^{-3}$ гПа. (Z)-изомер, жидкость, т. кип. 133°C/14,5 гПа; 115°C/6,7 гПа; 98°C/1,3 гПа; $P_{20} 7,3 \cdot 10^{-3}$ гПа.

Товарный изоэвгенол — смесь изомеров с примерным соотношением (E):(Z)~ 85:15, т. заст. ~12°C.

Острая токсичность по RIEM (1975): oral LD_{50} 1,56 г/кг (крысы)

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1984	98	1,082–1,086	20/4	1,573–1,578	>100	(E):(Z)= 88:12
H. + R., 1988	99	1,081–1,085	25/25	1,574–1,577	137	
IFF, 1992	97	1,080–1,088	20/4	1,572–1,578	>100	
BBA, 1990	—	1,080–1,085	20/4	1,572–1,578	110	
РФ, 1990	96	1,083–1,086	20/4	1,574–1,578	123	

Получают изомеризацией эвгенола под действием едких щелочей; возможно использование других катализаторов изомеризации.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках. Максимальная концентрация, разрешенная IFRA, 1%.

Пути синтетического получения изоэвгенола из гваякола не нашли промышленного применения. Один из таких путей, предложенный Е. Д. Волковой, В. Н. Беловым и С. И. Лурье (Труды ВНИИСНДВ, вып. II, 1954, с. 43–45), был реализован в полузаводском масштабе, но не осуществлен в крупном производстве.

Схема этого синтеза предусматривает получение пропионата гваякола, перегруппировку Фриса ($AlCl_3$, нитробензол) до смеси пропиофенонов, каталитическое гидрирование до карбинолов, дегидратацию и выделение изоэвгенола. Недостатки синтеза — многостадийность и необходимость работы с $AlCl_3$ и нитробензолом.

6.248. Метиловый эфир изоэвгенола

3,4-Диметокси-1-пропенилбензол, Methyl isoeugenol (Arc. 2027, RIFM, GIV), Isoeugenol methyl ether (H.+R., Miltitz).

$C_{11}H_{14}O_2$, 178,23

CH_3O OCH_3

С. А. 93-16-3

Содержится в цейлонском цитронелловом масле, ЭМ *Malaleuca bracteata* и др.

Запах — мягкий, пряный, цветов гвоздики. Жидкость, т. пл. 5,5 6°С; т. кип. 270°С/1013 гПа; 136–137°С/10,6 гПа. Содержание (Z)-изомера обычно составляет ~15%.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 2,5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	1,047–1,053	25/25	1,565–1,569	>100	Изоэвгенол <1%
H. + R., 1988	98	1,048–1,053	25/25	1,565–1,568	128	
Miltitz, 1991	98	1,050–1,058	20/20	1,566–1,569	128	
IFF, 1992	97	1,047–1,055	25/25	1,565–1,570	>100	

Получают метилированием изоэвгенола или щелочной изомеризацией метилового эфира эвгенола.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.249. Бензиловый эфир изоэвгенола

Бензилизоэвгенол, *trans*-Benzyl-iso-eugenol (Arc. 313), Benzyl isoeugenol (RIFM, GIV, IFF).

$C_{17}H_{18}O_2$; 254,33

O OCH_3

С. А. 120-11-6

Запах — тонкий, цветочный, пряный.

Твердое вещество, (E)-изомер — т. пл. 59–60°C, (Z)-изомер — т. пл. 32–34°C.

Продукт, вырабатываемый GIV (1984), содержит не менее 98% (ГЖХ) бензилового эфира изоэвгенола и имеет минимальную т. заст. 57°C; т. всп. >100°C. Продукт IFF (1992) содержит минимум 84% (ГЖХ) эфира, т. пл 56–60°C.

Может быть получен изомеризацией бензилового эфира эвгенола под действием едкого калия.

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.250. Изоэвгенилацетат

4-Ацетокси-3-метокси-1-пропенилбензол, Acet-iso-eugenol (Arc. 15), Isoeugenyl acetate (RIFM), Acetyl isoeugenol (GIV, IFF). $C_{12}H_{14}O_3$; 206,34

O
O
OCH_3

C. A. 93–29–8

Запах — пряный, цветочный, гвоздичный, со слабыми оттенками ванили, клубники. Твердое вещество, т. пл. 79–81°C; т. кип. 282°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,45 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
GIV, 1984	98	76	>100
IFF, 1992	98	78	>101

Получают ацетилированием изоэвгенола уксусным ангидридом.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

6.251. Дифенилоксид

Дифениловый эфир, Diphenyl oxyde (Arc. 1081, RIFM, GIV, H. + R.) $C_{12}H_{10}O$; 170,21

O

C. A. 101–84–8

Запах — резкий, листьев герани, с оттенком запаха фенола. Кристаллизующаяся жидкость, т. заст. 27–28°C; т. кип. 121°C/13,4 гПа; $P_{20}1,19 \cdot 10^{-2}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 3,37 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °C	d_{25}^{25}	n_D^{25}	Т. всп., °C	Дополнительные данные
GIV, 1961	—	26,5	1,072–1,074	—	115	
EOA	—	26,7	1,072–1,074	1,578–1,579	—	
H.+R., 1988	99	26,5	1,065–1,073	—	125	
РФ, 1990	—	26,5	—	—	114	Отсутствие фенола

Получают взаимодействием хлорбензола с фенолятом натрия при катализе солями меди.

В больших количествах используется при производстве отдушек для мыла, синтетических моющих средств и товаров бытовой химии Ограничений IFRA нет.

6.252. Яра-яра

Метиловый эфир *бета*-нафтола, 2-метоксинафталин, *beta*-Napthol methylether (Arc. 2302), β-Naphtyl methyl ether (RIFM), Yara yara (GIV, IFF), Nerolin yara yara (H. + R.).

$C_{11}H_{10}O$; 158,20

OCH3

C. A. 93-04-9

Запах — резкий, при разбавлении напоминает запах цветов апельсина, черемухи, акации. Кристаллический продукт, т. пл. 73°С; т. кип 274°С/1013 гПа; 138°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	—	71,5	—
H.+R., 1988	99	71,5	>100
IFF, 1992	98	71	—
РФ, 1990	—	72	—

Получают кипячением смеси *бета*-нафтол—метанол — серная кислота. Очистку технического продукта ведут методом сублимации

Используют главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет

6.253. Неролин

Этиловый эфир *бета*-нафтола, 2-этоксинафталин, *beta*-Naphtol ethylether (Arc. 2301), β-Naphtyl ethyl ether (RIFM), Nerolin (GIV), Nerolin bromelia (H. + R.).

$C_{12}H_{12}O$; 172.23

O

C. A. 93-18-5

Запах — цветочный (цветов апельсина), со слабыми нотами фруктов, индола. Кристаллическое вещество, т. пл. 37,5°С, т кип 282°С/1013 гПа; 148°С/13 гПа; $d_{50}^{50}1,051; n_D^{36}$ 1,5975.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 3,11 г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. заст., °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	—	35	—
H.+R., 1988	99	35	134
РФ, 1990	—	34	111

Получают кипячением смеси *бета*-нафтол—метанол — серная кислота. Очищают перегонкой в вакууме.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

6.254–6.261. ПРОИЗВОДНЫЕ ИНДАНА И ТЕТРАЛИНА

6.254. 1-Метоксииндан

1-Инданилметиловый эфир, Phloralid (PFW). $C_{10}H_{12}O$; 148,21

OCH3

C. A. 1006-27-5

Запах — очень сильный, цветочный, мятно-землистый. Продукт, вырабатываемый PFW (1983), содержит не менее 97% (ГЖХ) метоксииндана и имеет d_{20}^{20} 1,021 – 1,031; n_D^{20} 1,527–1,533; т. всп. 85°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения в дозах до 1% для модификации головных цветочных нот запаха. Ограничений IFRA нет.

6.255. Эсперон

4-Ацетил-6-трет.бутил-1,1-диметилиндан, $C_{17}H_{24}O$; 244,38
4-Acetyl-6-tert.butyl-1,1-dimethylindan
(Arc. 30, RIFM), Celestolide (IFF),
Musk DTI (Firm), Crysolide (GIV).

С. А. 13171-00-1

Запах — приятный, мускусный. Кристаллическое вещество, т. пл. 76,7–77,2°С.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °С	Т. всп., °С
Firm, 1980	98	76	>100
IFF, 1992	98	76	>101
GIV, 1984	98	76	>100
РФ, 1992	~98	76	134

Получают ацетилированием 1,1-диметил-6-трет.бутилиндана по Фриделю—Крафтсу ($AlCl_3$, нитробензол). Для получения исходного инданового производного были запатентованы и реализованы в производстве два способа: превращение 4-трет.бутилтолуола в его натровое производное, конденсация с металлилхлоридом, циклизация полученного ненасыщенного соединения (Theimer E., Lemberg S., пат. США 3275701, 9.09.63–27.09.66, РЖХ, 1968, 18Н156П) и циклоалкилирование трет.бутилбензола изопреном в присутствии серной кислоты (Wood T. F., пат. США 3078319, 2.03.60–19.02.63, РЖХ, 1965, 14Н106).

Эсперон находит применение в производстве парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 10%. Ограничений IFRA нет.

6.256. Фантолид

6-Ацетил-1,1,2,3,3,5-гексаметилиндан, $C_{17}H_{24}O$; 244,38
5-Acetyl-1,1,2,3,3,6-hexamethylindan
(Arc. 40, RIFM), Phantolid (PFW).

С. А. 15323-35-0

Запах — мускусный, с животной нотой. Кристаллическое вещество.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 1,7 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики). В 1978 г. обнаружен фототоксический эффект при нанесении на кожу мышей при концентрациях больше 1% (RIFM, 1979).

Продажный продукт PFW (1983) представляет собой смесь изомеров с широким интервалом т. пл. 37–58°С; т. всп. >100°С. Его получают циклоалкилированием *пара*-изопропенилтолуола изоамиленом и последующим ацетилированием по Фриделю—Крафтсу.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. IFRA рекомендует дозировку в композиции не более 10%.

6.257. Трасеолид

5-Ацетил-3-изопропил-1,1,2,6-тетраметилиндан, $C_{18}H_{26}O$; 258,41
Traseolide (Quest).

С. А. 68140-48-7

Запах — мускусный, стойкий. Жидкость, т. кип. 178°С/6,7 гПа, смесь изомеров.

Острая токсичность по RIFM (1983): oral LD_{50} 2,2, мл/кг (крысы), derm. LD_{50} > 1,25 г/кг (кролики).

Quest (1989) вырабатывает два сорта парфюмерного продукта. Traseolide: содержание изомерных кетонов не менее 97% (ГЖХ); d_{20}^{20}0,975 – 0,983; n_D^{20}1,528 – 1,534; т. всп. 156°С. Traseolide 70: содержание изомерных кетонов 70% (ГЖХ); d_{20}^{20}1,015 – 1,023; n_D^{20} 1,538–1,544; т. всп. 141°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 20%. Ограничений IFRA нет.

Продукт был разработан фирмами Naarden—Schell в качестве конкурента галаксолиду IFF.

6.258. Галаксолид

4,6,6,7,8,8-Гексаметил-1,3,4,6,7,8-гексагидроциклопента-γ-бензопиран, 1,3,4,6,7,8-Hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylcyclopenta-γ-2-benzopyran (Arc. 1581, RIFM), Calaxolide (IFF), Abbalide (BBA).

$C_{18}H_{26}O$; 258,41

C.A. 1222-05-5

Запах — сильный, мускусный, с древесным оттенком. Вязкая жидкость, т. кип. 129°C/1,1 гПа; d_4^{20} 1,005; n_D^{20} 1,534.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель, сорт	Растворитель	Содержание (ГЖХ), %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °C
IFF, Galaxolide 50	Диэтилфталат	48–52	1,031–1,043	1,518–1,528	>100
IFF, Galaxolide 50 BB	Бензилбензоат	48–52	1,033–1,043	1,538–1,548	>100
IFF, Galaxolide 50 IPM	Изопропилмиристат	48–52	0,939–0,951	1,488–1,498	>100
BBA, Abbalide DEP	Диэтилфталат	~50	~1,042	~1,523	>100
BBA, Abbalide BB	Бензилбензоат	~50	~1,045	~1,547	>100
BBA, Abbalide IPM	Изопропилмиристат	~50	~0,942	~1,494	>100
BBA, Abbalide DPG	Дипропиленгликоль	~50	~1,009	~1,495	>100

Промышленный синтез галаксолида, объем производства которого превышает 1000 т в год, базируется на разработке голландских химиков Бэтса и Хээринга (англ. пат. 991146, 1.02.63 5.05.65, РЖХ, 1966, 12Р469П).

Получаемый циклоалкилированием *альфа*-метилстирола 1,1,2,3,3-пентаметилиндан конденсируют с пропиленоксидом. Образовавшийся 5(2-гидрокси-1-метилэтил)-1,1,2,3,3-пентаметилиндан при взаимодействии с параформом или ацеталями формальдегида и кислым катализатором дает галаксолид.

H.CHO

Запатентован ряд усовершенствований технологии (Theimer E. T., пат. США 3532719, 28.10.68–6.10.70, РЖХ, 1971, 14Р491П; Sanders J. M., Michael L. H., пат. США 3910964, 1.05.74–7.10.75, РЖХ, 1976, 13Р516П; пат. США 3978090, 26.06.75–31.08.76, РЖХ, 1977, 11Р576П).

Галаксолид применяется в большом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 25%. Ограничений IFRA нет.

6.259. Индоксан

4,4a,5,9в-Тетрагидроиндено-[1,2-d]-*мета*-диоксин, Indoflor (H. + R.), Indolarome (IFF), Indolal, Florindal (Dragoco).

$C_{11}H_{12}O_2$; 176,22

C. A. 18096-62-3

Запах — напоминает запах индола, с нотами жасмина, нафталина. Кристаллическое вещество, т. пл. 36–38°C; т. кип. 134°C/13 гПа

Острая токсичность, по данным IFF (1992): oral LD_{50} 1,49 г/кг

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
H.+R., 1988	99	35	>100
IFF, 1992	97	36	>100
Dragoco, 1990	98	36–38	>100
РФ, 1990	98	35–37	121

Получают взаимодействием индена с формальдегидом (параформом) в присутствии серной кислоты (Дашунин В. М. и др., Сб. Журн. орг. хим. "Проблемы получения полупродуктов промышленного орг. синтеза", 1967, с. 206).

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках. Дозировка, как правило, не превышает 3%. Ограничений IFRA нет.

6.260. Магнолан

2,4-Диметил-4,4a,5,9в-тетрагидроиндено[1,2-d]-*мета*-диоксин, Magnolan (H. + R.).

$C_{13}H_{16}O_2$; 204,27

C. A. 27606-09-3

Запах — цветочный, напоминает запах магнолии, герани. Жидкость, т. кип. 64–65°C/0,07 гПа.

Магнолан, вырабатываемый H. + R. (1988), содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомерных диоксанов и имеет d_{25}^{25} 1,082 – 1,090; n_D^{20} 1,526–1,533; т. всп. 128°C.

Может быть получен взаимодействием индена с уксусным альдегидом (Heywood B. J., Meresz O., англ., пат. 1180797, 28.08.68-11.02.70, РЖХ, 1970, 19Р362П).

Применяется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

6.261. Тоналид

6-Ацетил-1,1,2,4,4,7-гексаметилтетралин, 7-Acetyl-1,1,3,4,4,6-hexamethyltetrahydronaphtalene (Arc. 41), Tonalid (PFW), Fixolide (GIV).

$C_{18}H_{26}O$; 258,41

C. A. 1506-02-1; 21145-77-7

Запах — сильный, мускусный, пудровый. Кристаллическое вещество, т. пл. 55,5°C; т. кип. 119°C/2,5 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	Минимальная т. пл., °C	Т. всп., °C
PFW, 1983	97	52	>100
GIV, 1986	98	53	>100

Объем производства тоналида превышает 1000 т в год. Синтез ведут циклоалкилированием *пара*-изопропенилтолуола тетраметилэтиленом и последующим ацетилированием полученного гексаметилтетралина хлористым ацетилом по Фриделю—Крафтсу.

Применяют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

7. КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИЕ ГЕТЕРОЦИКЛЫ

7.1–7.11. Производные фурана и пирана
7.12–7.21. Диоксаны
7.22–7.38. Лактоны

7.1–7.11. ПРОИЗВОДНЫЕ ФУРАНА И ПИРАНА

7.1. Фуранеол

2,5-Диметил-4-гидрокси-2H-фуран-3-он, Furaneol (Firm.), Furonol (GIV). $C_6H_8O_3$; 128,13

С. А. 3658–77–3

Содержится в землянике, ананасе и др. фруктах.

Запах — земляники, ананаса (при разбавлении). Кристаллы с т. пл. 78–80°С.

Продажный продукт имеет обычно т. пл.> 75°С.

Реализованный Firm промышленный синтез фуранеола состоит в озонолизе 3-гексин-2,5-диола, получаемого этинилированием ацетальдегида, и в последующей циклизации образующегося дикетона:

(ReL. и др., Helv. Chim. Acta, 1973, 56, № 6, 1882, РЖХ, 1974, 4Ж540).

Объем производства составляет несколько десятков тонн в год.

Используется главным образом при производстве пищевых ароматических эссенций. Может быть использован в парфюмерных композициях.

7.2. Гептилтетрагидрофуран

2-Гептилтетрагидрофуран, гептуран, 2-(n-Heptyl)-tetrahydrofuran (Arc. 1563), 2-Heptyltetrahydrofuran (RIFM), Florane (Naarden-Quest). $C_{11}H_{22}O$; 170, 30

С. А. 2435–16–7;
71662–35–6

Запах — сильный, цветочно-фруктовый с нотой свежей зелени. Жидкость, т. кип. 75°С/6,7 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1988): oral LD_{50}>5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики). По данным Naarden (1985), — oral LD_{50}> 15 мл/кг (крысы).

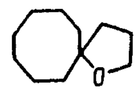
В соответствии со спецификацией Quest (1989) продажный продукт содержит не менее 95% (ГЖХ) гептилтетрагидрофурана и имеет d_{20}^{20} 0,853–0,857; n_D^{20} 1,438–1,442; т. всп. 86°С.

Может быть получен каталитическим гидрированием 4-ундеканолида в жестких условиях (В. М. Дашунин и др., Масло-жировая пром-сть, 1966, №12, 36).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

7.3. Оксаспирододекан

1-Оксаспиро-[4,7]-додекан, Oxyvet (Henkel). $C_{11}H_{20}O$; 168, 28



Запах — очень сильный, животный, нота индола. Жидкость, т. кип. 112°С/16 гПа.

Продажный продукт Henkel содержит 95% (ГЖХ) оксаспирододекана и имеет d_{25}^{25} 0,963; n_D^{20} 1,482–1,486; т. всп. 68°С.

Получают радикальным присоединением циклооктанола к акриловой кислоте с последующим восстановлением и дегидратацией (Schaper U. A. и др., заявка ФРГ 3306798, 26.02 83–30 08 84, РЖХ 1985, 12Р521П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках Ограничений IFRA нет.

7.4. Гидрожасмаль

Смесь 2-фурфурилиденгептанола и 2-фурфурилгептанола, Hydrojasmal (Dragoco) — $C_{12}H_{18}O_2$; 194,27; $C_{12}H_{20}O_2$; 196,29

С. А. 68411-59-6

Запах — мягкий фруктовый, жасмина. Жидкость.

Продажный продукт Dragoco содержит не менее 80% (ГЖХ) суммы названных соединений и имеет d_4^{20} 0,957–0,967; n_D^{20} 1,468–1,478; т. всп. > 100°С.

Может быть получен конденсацией фурфурола с гептаналем и последующим восстановлением.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 15%.

7.5. Мальтол

3-Гидрокси-2-метил-4-пирон, Maltol (Arc. 1831, RIFM), Corps praline (Firm.) — $C_6H_6O_3$; 126,12

С. А. 118-71-8

Содержится в ЭМ некоторых хвойных деревьев, древесной смоле, поджаренном солоде, молоке и др. Запах — мягкий, карамели, при разведении — ноты малины, клубники. Кристаллическое вещество, т. пл. 162–164°С; т. кип. 105°С/6,7 гПа, возгоняется, перегоняется с водным паром.

Острая токсичность по RIFM (1975) — oral LD_{50} 2,33 г/кг (крысы).

Продажный продукт — кристаллы или порошок белого цвета с т. пл. в пределах 155–160°С.

Получают из древесной (буковой) смолы путем извлечения растворами соды или щелочи и последующей вакуум-перегонки нейтрализованного продукта. Синтетические способы, например, гидролиз стрептомицина (В. М. Дашунин, Труды ВНИИСНДВ, 1963, вып. VI, с 73), в промышленном масштабе не реализованы.

Мальтол используют главным образом в пищевых ароматических эссенциях. В парфюмерных композициях применяется довольно редко, хотя ввод в композиции даже небольших доз дает заметный эффект. Ограничений IFRA нет.

7.6. Жиран

2-Бутил-4,6-диметилдигидропиран, Gyrane (Naarden-Quest). — $C_{11}H_{20}O$; 168,28

Запах — свежей зелени, цветочный с нотой герани. Жидкость, т. кип. 65–68°С/8 гПа. Смесь изомеров.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 10 мл/кг.

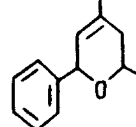
Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 83% (ГЖХ) названного соединения и имеет d_{20}^{20} 0,860–0,866; n_D^{20} 1,446–1,449, т. всп. 75°С.

Получают взаимодействием 2-метил-1-пентен-4-ола, пентаналя и каталитического количества пара-толуолсульфокислоты (англ. пат. 1215256, 21.02.69-9.12.70).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

7.7. Фениран

2,4-Диметил-6-фенилдигидропиран, Fenyrane (Naarden-Quest), Pelargene (Quest). — $C_{13}H_{16}O$; 188,27



С. А. 30310-41-9;
68039-40-7;
68039-41-8

Запах — интенсивный цветочный (розы, герани) с пряной нотой. Жидкость, т. кип. 95°С/1,3 гПа. Смесь изомеров. Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 3,7 мл/кг (крысы).

Коммерческие продукты, Quest (1989)

Сорт	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{20}^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Fenyrane	93	0,990–0,995	1,525–1,528	115
Pelargene	96	~0,990	~1,527	>100

Может быть получен взаимодействием бензальдегида с 2-метил-1-пентен-4-олом в присутствии кислого катализатора.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.8. Пинорав

2,2,6-Триметил-5-пренил-тетрагидропиран, Pinoran (РФ). $C_{13}H_{24}O$; 196,33

Запах — цветочный с хвойным оттенком. Жидкость, т. кип. 90–92,5°С/6,7 гПа; d_4^{20} 0,884; P_{20} $7{,}2\cdot10^{-2}$ гПа (основной изомер). Смесь четырех изомеров.

Острая токсичность, по данным ВНИИСНДВ, — oral LD_{50} ~ 13,3 г/кг (крысы, мыши).

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит не менее 90% (ГЖХ) смеси изомеров пинорана и не менее 75% 2,2,6-триметил-5-пренилтетрагидропирана и имеет n_D^{20} 1,457–1,460; т. всп. 91°С.

Получают селективным гидрированием дипренилацетона (отхода производства метилгептенона из пренилхлорида и ацетона) на меднохромовом катализаторе и последующей циклизацией смеси непредельных спиртов (В. М. Андреев и др., Масло-жировая пром-сть, 1979, № 3, с. 36).

Используют в парфюмерных композициях и главным образом в отдушках для мыла и синтетических моющих средств.

7.9. Жасмин-8

4-Ацетокси-3-пентилтетрагидропиран (основной компонент). "Nonane diol-1,3-acetate" (Arc. 2346, RIFM) — ошибочное название. Jasmonyl (GIV), Jasmophyll (H.+R.), Jasmal (IFF), Jasmopyrane. Jasilin (Quest), Drago-Jasmia (Dragoco), Jaswalia (Wacker). $C_{12}H_{22}O_3$; 214,31

C. A. 18871-14-2

Запах — цветов жасмина с оттенками запаха грибов, лаванды, травы (по-разному у разных изготовителей). Жидкость, т. кип. 102–103°С/1,3 гПа; P_{20} $7{,}3\cdot10^{-3}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготовитель	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °С	Дополнительные данные
GIV, 1961	0,964–0,970	25/25	1,441–1,445	>100	ЭЧ 280–320
H.+R., 1988	0,974–0,978	25/25	1,448–1,451	79	ГЖХ 92%
IFF, 1992	0,972–0,980	20/4	1,445–1,450	>100	ГЖХ 80%
Quest, 1989	0,976–0,980	20/20	1,448–1,451	66	Jasmopyrane ГЖХ83%
Dragoco, 1990	0,969–0,975	20/4	1,440–1,446	>110	-
Wacker, 1987	~0,973	20/20	1,44–1,46	116	-

Может быть получен из 1-октена и параформа при кипячении в среде уксусной и серной кислот (Н. П. Соловьева и др., авт. свид. 202964, 15.04.66–7.12.67). В реакционной смеси кроме 4-ацетокси-3-пентилтетрагидропирана находятся: 4-гексил-1,3-диоксан, диацетат 1,3-нонандиола и 4-гидрокси-3-пентилтетрагидропиран.

Запах товарного продукта зависит от способа и степени разделения этой реакционной смеси.

Используют в парфюмерных композициях и в большом ассортименте отдушек для мыла и моющих средств. Ограничений IFRA нет.

7.10. Жасмин-9

4-Ацетокси-3-гексилтетрагидропиран (основной компонент), Jasmin-9 (РФ). $C_{13}H_{24}O_3$; 228,33

Запах — сильный, цветов жасмина. Жидкость, т. кип. 84°C/0,13 гПа; P_{20} $2{,}3\cdot10^{-3}$ гПа.

Продажный продукт, вырабатываемый в РФ (1990), содержит сложных эфиров с мол. массой 228,33 не менее 80% и имеет n_D^{20} 1,449–1,454; т. всп. 124°C. Соотношение основных компонентов (минимум):

4-ацетокси-3-гексилтетрагидропиран — 50%,
4-гидрокси-3-гексилтетрагидропиран — 15%,
4-гептил-1,3-диоксан — 10%,
диацетат 1,3-декандиола — 8%.

Получают взаимодействием 1-нонена с формальдегидом (или параформом) в среде уксусной и серной кислот (Н. П. Соловьева и др., авт. свид. 202964, 15.04.66–7.12.67; Химия гетероцикл. соед. 1971, № 11, с. 1447). Используют в парфюмерных композициях и отдушках.

7.11. Оксаспиран

4-Метилен-1-оксаспиро-[5,5]-ундекан, Oxaspirane (IFF). $C_{11}H_{18}O$; 166,26

С. А. 57094-40-3

Запах — сильный травянистый, мятная, камфарная, кедровая ноты. Жидкость.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 95% (ГЖХ) суммы изомеров оксаспирана и имеет d_4^{20} 0,951–0,959; n_D^{20} 1,482–1,487; т. всп. 81°C.

Может быть получен взаимодействием изобутенилкарбинола с циклогексаноном при катализе серной кислотой с одновременной или последовательной дегидратацией частично образующегося третичного спирта (Hall J. B. и др., пат. США 4186103, 6.04.79–29.01.80, РЖХ 1980, 21Р616П).

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 5%. Ограничений IFRA нет.

7.12–7.21. ДИОКСАНЫ

7.12. Гербоксан

2-Бутил-4,4,6-триметил-1,3-диоксан, Herboxan (Naarden-Quest) $C_{11}H_{22}O_2$; 186. 30

С. А. 54546-26-8

Запах — травянистый, пряный с нотой ромашки. Жидкость, т. кип. 81–82°C/1,3 гПа.

Острая токсичность, по данным Naarden (1985), — oral LD_{50} 10 мл/кг (крысы).

Продажный продукт Quest (1989) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного диоксана и имеет d_{20}^{20} 0,887–0,892; n_D^{20} 1,427–1,432; т. всп. 76°C.

Получают ацетализацией пентаналя действием 2-метил-2,4-пентандиола в присутствии кислотного катализатора (голл. пат. 166187, 18.04.73–15.07.81, РЖХ 1982, 7Р629П; англ. пат. 1465320, 5.04.74–23.02.77).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения при дозировке до 30%. Ограничений IFRA нет

7.13. Антоксан

4-Изопропил-5,5-диметил-1,3-диоксан, Anthoxan (Henkel). $C_9H_{18}O_2$; 158,24

C. A. 3583-00-4

Запах — травянистый, камфарная нота. Жидкость, т. кип. 71°C/27 гПа.

Продажный продукт Henkel содержит 95% (ГЖХ) названного диоксана и имеет d_4^{20}~0,936; n_D^{20} 1,437–1,441; т. всп. 53°C. Получают ацетализацией формальдегида действием 2,2,4-триметил-1,3-пентандиола в присутствии кислотного катализатора. (Bruns K. и др., заявка ФРГ 2648109, 23.10.76–27.04.78, РЖХ 1979, 6Р653П).

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.14. Вердоксан

2,2,5,5-Тетраметил-4-изопропил-1,3-диоксан, Verdoxan (Henkel). $C_{11}H_{22}O_2$; 186,30

C. A. 61920-45-4

Запах — древесный с нотами зелени, фруктов, земли. Жидкость, т. кип. 70°C/17 гПа.

Острая токсичность, по данным Henkel: oral LD_{50}>3,1 г/кг (мыши).

Продажный продукт Henkel содержит 95% (ГЖХ) названного диоксана и имеет d_{25}^{25}~0,892; n_D^{20}1,428–1,432; т. всп. 54°C. Получают взаимодействием 2,2,4-триметил-1,3-пентандиола с ацетоном и орто-муравьиным эфиром в присутствии кислотного катализатора (Bruns K. и др., заявка ФРГ 2648109, 23.10.76–27.04.78, РЖХ 1979, 6Р653П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.15. Троенан

5-Метил-5-пропил-2-(1-метилбутил)-1,3-диоксан, Troenan (Henkel). $C_{12}H_{24}O_2$; 200,32

C. A. 80480-24-6

Запах — зеленых растений. Жидкость, т. кип. 72°C/0,03 гПа. Смесь изомеров.

Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% смеси изомеров названного диоксана и имеет d_{25}^{25}~ 0,889; n_D^{20} 1,440–1,443; т. всп. 126°C.

Получают взаимодействием 2-метилпентаналя, 2-метил-2-пропил-1,3-пропандиола и орто-эфира муравьиной кислоты в присутствии кислотного катализатора (Upadek H., Bruns K., заявка ФРГ 3016007, 25.04.80–12.11.81, РЖХ 1982, 19Р400П). Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.16. Спирофлор

3-Этил-2,4-диоксаспиро-[5,5]-8-ундецен, Spiroflor (Henkel). $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

C. A. 74235-28-2

Запах — сложный натуральный, цветочно-фруктовый, ноты розы, жасмина, гиацинта, меда. Жидкость, т. кип. 86°C/6 гПа. Смесь изомеров.

Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного диоксана и имеет d_4^{20}~1,012; n_D^{20} 1,473–1,477; т. всп. 103°C. Может быть получен взаимодействием 1,1-дигидроксиметил-3-циклогексена с пропионовым альдегидом. Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.17. Диметилэтилдиоксаспироундецен

3-Этил-9,11-диметил-2,4-диокса-спиро-[5,5]-8-ундецен, Corps céleri (Henkel). $C_{13}H_{22}O_2$; 210,32

С. А. 71566-53-5

Запах — натуральный травянистый с типичной нотой сельдерея. Жидкость, т. кип. 108–110°С/6,7 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Henkel содержит ~ 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного диоксана и имеет d_{25}^{25}~0,987; n_D^{20} 1,477–1,481; т. всп. 118°С. Может быть получен из альгрина превращением его в замещенный 1,3-диол и далее в 1,3-диоксан:

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

7.18. Бонарокс

3-Метил-2,4-диокса-7,10-метано-спиро-[5,5]-ундекан, Bonarox (Henkel) $C_{11}H_{18}O_2$; 182,26

С. А. 87641-24-5

Запах — фруктовый, свежей зелени, нота гальбанума. Жидкость, т. кип. 67–70°С/1,7 гПа, смесь изомеров.

Продажный продукт Henkel содержит 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного спиродиоксана и имеет d_{25}^{25}~ 1,049; n_D^{20}1,482–1,484; т. всп. 102°С.

Получают четырехстадийным синтезом из циклопентадиена и акролеина (Bruns K., Dany T. N., заявка ФРГ 3025187, 3.07.80–11.02.82, РЖХ 1983, 8Р586П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет

7.19. Бергоксан

8,8-Диметилокталин-2-спиро-5'(2'-метил-1',3'-диоксан), Bergoxane (PFW). $C_{16}H_{26}O_2$; 250,39

Запах — мягкий, стойкий, древесный с нотой ветиверии. Жидкость. Смесь изомеров.

Продажный продукт PFW (1985) содержит не менее 98% (ГЖХ) смеси изомеров названного спиродиоксана и имеет d_{20}^{20} ~1,020; n_D^{20}~1,500; т. всп. >100°С.

Может быть получен из циклоциклоналя действием формальдегида и щелочи и последующей ацетализацией образующимся диолом уксусного альдегида.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и в отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

7.20. Циклолиметталь

4,6-Диокса-5-изопропилтрицикло-[7,2,1,$0^{2,8}$]-10-додецен, Cyclolimettal-80 (Henkel) $C_{13}H_{20}O_2$; 208,30

Запах — цветочный, цитрусовый, пряный. Жидкость, т. кип. 95°С/1,1 гПа; n_D^{25} 1,489.

Продажный продукт Henkel представляет собой 80%-ный раствор названного соединения в дипропиленгликоле. Этот раствор имеет d_{25}^{25}~1,031, n_D^{20} 1,484–1,486; т. всп. 112°С.

Получают ацетализацией изомасляного альдегида 2-бутен-1,4-диолом и последующим диеновым синтезом с циклопентадиеном (Conrad J. и др., заявка ФРГ 2918168, 5.05.79–13.11.80, РЖХ 1981, 19Р430П):

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.21. Спирамбрен

Каран-2-спиро-5′(2′,2′-диметил-1′,3′-диоксан), Spirambrene (Roure). $C_{15}H_{26}O_2$; 238, 38

Запах — сильный, амброво-древесный, стойкий. Жидкость. Острая токсичность, по данным Roure, — oral LD_{50}> 5 г/кг.

Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20}~0,989; n_D^{20}~1,479; т. всп. 124°С.

Может быть получен взаимодействием 2-формилкарана с формальдегидом и ацетализацией ацетона образовавшимся 2,2-ди-(гидроксиметил) караном.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.22–7.38. ЛАКТОНЫ

7.22. 4-Октанолид

гамма-Окталактон, Octanolide-1,4 (Arc. 2403) $C_8H_{14}O_2$; 142, 20
γ-Octalactone (RIFM), *gamma* Octalactone (GIV)

C. A. 104-50-7

Запах — сильный, кокосовых орехов. Жидкость, т. кип. 116–117°С/13 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50}> 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

В соответствии со спецификацией GIV (1961) продажный продукт содержит не менее 95% (омыл.) лактона и имеет d_{25}^{25} 0,970–0,980; n_D^{20} 1,443–1,447; т. всп. > 100°С.

Один из путей получения состоит во взаимодействии капронового альдегида с малоновой кислотой и в последующем декарбоксилировании.

Используется в некоторых парфюмерных композициях и отдушках Ограничений IFRA нет.

7.23. 4-Нонанолид

гамма-Ноналактон, Nonanolide-1,4 (Arc.2350), $C_9H_{16}O_2$; 156,23
γ-Nonalactone (RIFM, PFW), Aldehyde C-18 (so called) (GIV, H.+R.). Prunolide (GIV), Abricolin (H.+R.).

C. A. 104-61-0

Содержится в ЭМ *Rosa rugosa*.

Запах — сливок, кокосовых орехов, при разбавлении — фруктовая нота. Жидкость, т. кип. 136°С/17 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 6,6 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Коммерческие продукты

Изготонитель	Минимальное содержание (ГЖХ), %	d_{25}^{25}	n_D^{20}	Т. всп., °С
GIV, 1987	98	0,961–0,966	1,445–1,450	>100
H.+R, 1988	98	0,959–0,965	1,445–1,448	130
PFW, 1983	95	0,961–0,969	1,445–1,449	>100

Получают взаимодействием гексилового спирта с метилакрилатом в присутствии дитрет. бутилперекиси. Другой возможный путь получения — взаимодействие энантового альдегида с малоновой кислотой и последующее декарбоксилирование (Bunce R. A., Reeves H. D., Journ. Chem. Educ. 1990, 67, № 1, 69, РЖХ 1990, 20А71).

Используют при дозировке до 2% в парфюмерных композициях и отдушках. Широко примеияют в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

7.24. 4-Деканолид

гамма-Декалактон, *gamma*-n-Decalactone (Arc. 828), γ-Decalactone (RIFM), Decalactone gamma (GIV).

$C_{10}H_{18}O_2$; 170, 25

C. A. 706-14-9

Запах — интенсивный фруктовый, персика. Жидкость, т. кип. 281°C/1013 гПа, 156°C/23 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50}>5 г/кг (крысы), derm. LD_{50}> 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт GIV (1986) содержит не менее 98% (ГЖХ) смеси изомерных лактонов и имеет d_4^{20} 0,951–0,955; n_D^{20} 1,447–1,451; т. всп. > 100°C.

Может быть получен взаимодействием октилового альдегида с малоновой кислотой с последующим декарбоксилированием.

Используют в небольшом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек при дозировке до 2%. Ограничений IFRA нет.

7.25. 4-Ундеканолид

гамма-Ундекалактон, *gamma*-Undecalactone (Arc. 3024, RIFM, PFW), Aldehyde C-14 (so called) (GIV, H.+R.), Peach aldehyde coeur (IFF).

$C_{11}H_{20}O_2$; 184, 28

C. A. 104-67-6

Запах — сильный фруктовый, персика, абрикоса. Жидкость, т. кип. 286°C/1013 гПа; 167–169°C/20 гПа; 162°C/17 гПа; возможна примесь *дельта*-изомера.

Острая токсичность по RIFM (1975): oral LD_{50} 18,5 г/кг (крысы)

Изготовитель	Минимальное содержание, %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Т. всп., °C
GIV, 1984	98 (ГЖХ)	0,942–0,945	25/25	1,449–1,452	>100
H.+R., 1988	98 (омыл.)	0,940–0,945	25/25	1,449–1,454	>100
IFF, 1992	98 (ГЖХ), γ-изомер-92	0,942–0,948	20/4	1,449–1,454	>100
PFW, 1983	95 (ГЖХ)	0,940–0,948	20/20	1,449–1,453	>100

Традиционный метод получения — изомеризация 10-ундециленовой кислоты и лактонизация в присутствии кислотных катализаторов — дает продукт, содержащий много дурнопахнущих примесей, отделение которых затруднительно. Лучший по качеству 4-ундеканолид получают при взаимодействии октанола с метилакрилатом и дитрет. бутилперекисью (Фролкина М. В. и др., Пищевая пром-сть, 1991, № 12, с. 72).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках при дозировке до 5%, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

7.26. 4-Додеканолид

гамма-Додекалактон, *gamma*-Dodecalactone (Arc. 1102, RIFM), Dodecalactone gamma (Firm.).

$C_{12}H_{22}O_2$; 198,31

C. A. 2305-05-7

Запах — приятный масляно-пудровый, нота персика, стойкий. Жидкость, т. кип. 258°C/1013 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral LD_{50} > 5 г/кг (крысы), derm. LD_{50} > 5 г/кг (кролики).

Продажный продукт Firm. (1992) имеет d_{20}^{20} 0,935–0,939; n_D^{20} 1,451–1,454; т. всп. > 100°C.

Может быть получен взаимодействием нонилового спирта с метилакрилатом и дитрет бутилперекисью. Используется в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения, а также в пищевых ароматических эссенциях. Ограничений IFRA нет.

7.27. 4-Метил-4-деканолид

гамма-Метил-*гамма*-декалактон, 4-метил-4-гексилбутиролактон, γ-Methyl decalactone (RIFM), Lactojasmon (H.+R.).

$C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

C. A. 7011-83-8

Запах — цветочный (гардении) с нотами фруктов, кокосовых орехов, зелени. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1979): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Продажный продукт H.+R. (1988) содержит не менее 98% (ГЖХ) названного лактона и имеет d_{25}^{25} 0,941–0,944; n_D^{20} 1,448–1,452; т. всп. 61°С.

Используется в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.28. 5-Деканолид

дельта-Декалактон, *delta*-Decalactone (Arc. 829, RIFM, Firm.)

$C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

C. A. 705-86-2

Содержится в кокосовых орехах, малине, фруктах.

Запах — кокосовых орехов, фруктовый (персика). Вязкая жидкость, т. кип. 281°С/1013 гПа; 117–120°С/0,03 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1976): oral $LD_{50} > 5$ г/кг (крысы), derm. $LD_{50} > 5$ г/кг (кролики).

Коммерческий продукт Firm. (1992) содержит не менее 98% (ГЖХ) декалактона и имеет d_{20}^{20} 0,968–0,974; n_D^{20} 1,457–1,461; т. всп. > 100°С Он стал более доступным после организации промышленного производства гедиона. Полупродукт синтеза гедиона — 2-пентилиденциклопентанон — гидрируют до так называемого дельфона, который может быть превращен окислением по Байеру-Виллигеру в 5-деканолид:

Используют в пищевых ароматических эссенциях и некоторых парфюмерных композициях. Ограничений IFRA нет.

7.29. Метилтуберат

Смесь 3-метил-4-пентил-3-бутен-4-олида и 3-метил-5-бутилпентан-5-олида, Methyl tuberate (Roure).

$C_{10}H_{16}O_2$; 168,24
$C_{10}H_{18}O_2$; 170,25

Запах — сильный цветочный, ноты туберозы, гардении, фруктов. Жидкость.

Острая токсичность, по данным Roure, — oral $LD_{50} > 2$ г/кг.

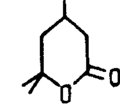
Продажный продукт Roure имеет d_{20}^{20} 0,936–0,942; n_D^{20} 1,451–1,455; т. всп. 134°С.

Рекомендуется для использования в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.30. Триметил-5-пентанолид

3,5,5(3,3,5)-Триметил-5-пентанолид, 4,6,6(4,4,6)-триметилтетрагидропиран-2-он, Trivalon (Henkel).

$C_8H_{14}O_2$; 142,20



C. A. 71566-51-3

Запах — горький, лесных орехов, нота сена. Жидкость, т. кип. 90–92°C/4 гПа.

Продажный продукт Henkel содержит не менее 95% (ГЖХ) смеси изомеров названного лактона и имеет d_{25}^{25} ~ 0,981; n_D^{20} 1,446–1,450; т. всп. 112°C.

Получают окислением соответствующей смеси триметилциклопентанонов надуксусной кислотой по Байеру-Виллигеру (Schaper A.-U., Bruns K., заявка ФРГ 2818244, 26.04.78–8.11.79, РЖХ 1980, 20Р495П).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках различного назначения. Ограничений IFRA нет.

7.31. Костолон

4-Этил-4-бутил-5-пентанолид, 4-этил-4-бутил-*дельта*-валеролактон, Costaulon (PFW). $C_{11}H_{20}O_2$; 184,28

C. A. 67770-79-0

Запах — сильный, животный с нотой масла костуса. Жидкость.

Продукт, вырабатываемый PFW (1983), содержит минимум 97% (ГЖХ) названного лактона и имеет d_{20}^{20} 0,983–0,993; n_D^{20} 1,464–1,467; т. всп. > 100°C.

Используют обычно растворенным в триэтилцитрате. Этот раствор имеет торговое название Costausol (d_{20}^{20} 1,113–1,123; n_D^{20} 1,443–1,469). Применяют в парфюмерных композициях и отдушках.

7.32. Жасмолактон

Природный: (–)-*цис*-7-децен-5-олид, синтетический: 8-децен-5-олид или Jasmolactone (Firm.). $C_{10}H_{16}O_2$; 168,24

C. A. 32764-98-0

Цис-7-децен-5-олид содержится в абсолютном масле крупноцветного жасмина, а также в ЭМ туберозы, гардении, мимозы и ЭМ *Osmanthus*.

Продукт, вырабатываемый Firm. под торговым названием Jasmolactone, отличается от природного *цис*-7-деценолида (C. A. 32686-71-0) положением двойной связи и ее геометрией. Он содержит минимум 97% (омыл.) лактона и имеет d_{20}^{20} 0,995–1,005; n_D^{20} 1,475–1,480; т. кип 82°C/0,3 гПа, т. всп. > 100°C. Его запах характеризуется как маслянисто-фруктовый с цветочной нотой.

Рекомендуется применять в парфюмерных композициях при дозировке 0,5–1%. Ограничений IFRA нет.

7.33. Флорекс

3-Окса-9(10)-этилидентрицикло-[6,2,1,0^{2,7}] ундекан-4-он, Florex (Firm.) $C_{12}H_{16}O_2$; 192,26

C. A. 69486-14-2;
69486-15-3

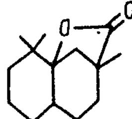
Запах — бальзамический, древесный с нотой бобов тонка, стойкий. Жидкость, т. кип. 220°C/1013 гПа. Смесь изомеров.

Продажный продукт Firm. (1983) содержит не менее 90% (ГЖХ) изомерных лактонов и имеет d_{20}^{20} 1,103–1,111; n_D^{20} 1,517–1,526; т. всп. > 100°C. Спецификация Firm. (1992) предусматривает d_{20}^{20} 1,106–1,113; n_D^{20} 1,517–1,523.

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках. Ограничений IFRA нет.

7.34. Мирцелид

Лактон 4а-гидрокси-3,5,5-триметилдекагидронафталин-3-карбоновой кислоты; Lactoscatone (Dragoco) $C_{14}H_{22}O_2$; 222,33



Запах — фекально-животный, сильный. Жидкость. Смесь изомеров. Т. кип. 127–131°C/2,7 гПа.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Содержание смеси изомеров, %	d_4^{20}	n_D^{20}	Т. всп., °С
Dragoco, 1989	95 (ГЖХ)	1,049–1,053	1,494–1,498	155
РФ, 1990	85 (омыл.)	~ 1,053	1,495–1,497	—

Получают диеновым синтезом мирцена и метилметакрилата и последующей лактонизацией под действием кислоты.

В зависимости от условий диенового синтеза (термический, каталитический) и условий лактонизации образуются смеси четырех изомеров различного состава. Во всех случаях преобладают *гамма*-лактоны: лактон 4а-гидрокси-3,5,5-триметилдекагидроиафталин-3-карбоновой кислоты и его 8а-гидрокси-2,5,5-триметил-2-карбокси-изомер (Ohloff G. в книге Fragrance Chemistry, Ed. Theimer E., 1982, с. 557).

Используют в парфюмерных композициях и отдушках обычно в очень небольших дозах. Ограничений IFRA нет.

7.35. Кумарин

1-Бензопиран-2-он, лактон *орто*-гидроксикоричной кислоты, Coumarin (Arc. 704, RIFM, BBA, R.-P.)

$C_9H_6O_2$; 146,15

С. А. 91-64-5

Содержится в бобах тонка и многих ЭМ.

Запах — сладкий, травянистый, сильный, при разбавлении — ноты сена, табака. Кристаллы, т. пл. 70°С; т. кип. 291°С/1013 гПа; 154°С/13,3 гПа; 138,5°С/6,7 гПа; P_{20} $5{,}7\cdot10^{-4}$ гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974) — oral LD_{50} 0,49 г/кг (крысы).

В спецификациях на коммерческие продукты обычно нормируется т. пл.: для GIV (1961) и R.-P.(1990) т. пл. ≥68°С, для BBA (1990) и РФ (1990) т. пл. ≥69°С.

По данным R.-P., чистота ≥ 99%, т. всп. 162°С. По данным РФ, т. всп. 151°С.

Используемый в РФ способ промышленного производства кумарина состоит во взаимодействии 60%-ного технического салицилового альдегида с уксусным ангидридом при одновременной отгонке образующейся уксусной кислоты (Ю. И. Дучинская, А. Г. Чебышев, Производство синтетических душистых веществ, 1959, с. 81). Кумарин применяется в большом ассортименте парфюмерных композиций и отдушек различного назначения. Ограничений IFRA нет.

7.36. Дигидрокумарин

3,4-Дигидро-1-бензопиран-2-он, Dihydrocoumarin (Arc. 934, RIFM, H.+R., R.-P., BBA), Melilotine (GIV, Miltitz).

$C_9H_8O_2$; 148,16

С. А. 119-84-6

Запах — сладкий, травянистый, ноты сена, корицы. Кристаллизующаяся жидкость, т. пл. 24°С; т. кип. 272°С/1013 гПа; 146°С/23 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1974): oral LD_{50} 1,65 г/кг, derm. LD_{50} > 5 г/кг. Установлено, что 20%-ный раствор дигидрокумарина вызывает раздражение кожи человека.

Коммерческие продукты

Изготовитель	Минимальное содержание (омыл.), %	$d_{t_1}^{t_2}$	t_2/t_1	n_D^{20}	Минимальная т. заст., °С	Т. всп., °С
GIV, 1961	—	1,186–1,190	25/25	—	22,5	>100
H.+R., 1988	98	1,187–1,195	25/25	1,554–1,558	—	>100
R.-P., 1990	—	1,185–1,195	25/4	1,555–1,560	23	130
BBA, 1990	98	1,185–1,195	20/20	—	23	—
Miltitz, 1991	98	1,187–1,191	25/25	1,554 1,557	22	>100

Обычно получают каталитическим гидрированием кумарина на никелевых катализаторах.

Используют в пищевых ароматических эссенциях. С 1974 г. IFRA не рекомендует применять дигидрокумарин в парфюмерных композициях и отдушках.

7.37. Октагидрокумарин

Октагидро-1-бензопиран-2-он, Octahydrocoumarin (RIFM), Cyclohexyl lactone (TAK). $C_9H_{14}O_2$; 154,21

C. A. 4430-31-3

Запах — сладкий, травянистый, бальзамический. Жидкость, т. кип. 144–146°С/21 гПа.

Острая токсичность по RIFM (1982): oral LD_{50} 3,9 г/кг (крысы), derm. LD_{50} 3,5 г/кг (кролики).

Продажный продукт TAK (1987) содержит не менее 98% октагидрокумарина и имеет d_{20}^{20} 1,088–1,098; n_D^{20} 1,488–1,498; т. всп. 152°С.

Может быть получен каталитическим гидрированием кумарина или присоединением эфира акриловой кислоты к циклогексанону по Михаэлю (Обата К. и др., японская заявка 62-93257, 18.10.85–28.04.87, РЖХ 1988, 7Р490П) и последующими превращениями полученного кетоэфира:

Рекомендуется использовать в парфюмерных композициях и отдушках для табака.

7.38. Пропилиденфталид

3-Пропилиденфталид, 3-Propyliden phthalide (Arc. 2720, RIFM), Celeriax (IFF). $C_{11}H_{10}O_2$; 174,20

C. A. 17369-59-4

Запах — пряно-травянистый, сельдерея, сильный. Жидкость.

Острая токсичность по RIFM (1978): oral LD_{50} 1,65 г/кг, derm. $LD_{50} > 2{,}5$ г/кг.

Продажный продукт IFF (1992) содержит не менее 83% (ГЖХ) пропилиденфталида и имеет d_4^{20} 1,125–1,133; n_D^{20} 1,583–1,589; т. всп. > 100°С.

Может быть получен взаимодействием фталевого ангидрида с ангидридом масляной кислоты в присутствии бутирата натрия при температуре 200–220°С.

Используют в парфюмерных композициях и отдушках. IFRA рекомендует максимальную дозировку в композициях 1%.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

ОГЛАВЛЕНИЕ

6.16. Метилкоричный спирт
6.17. 2,2-Диметил-3-фенилпропанол
6.18. Майантол
6.19. 3-Метил-5фенилпентанол
6.20. 2-Метил-5фенилпентанол
6.21. Амилкоричный спирт
6.22. Триизопропилбензиловый спирт
6.23. Диметилбензилкарбинол
6.24. Изобутилбензилкарбинол
6.25. Диметил-(4-метилбензил)-карбинол
6.26. Диметилфенилэтилкарбинол
6.27. Метилфенилэтилэтилкарбинол
6.28. Бензилметиловый эфир
6.29. Бензилизоамиловый эфир
6.30. Фенилэтилметиловый эфир
6.31. Фенилэтилэтиловый эфир
6.32. Фенилэтилизопропиловый эфир
6.33. Фенилэтилбутиловый эфир
6.34. Фенилэтилизоамиловый эфир
6.35. Фенилэтилаллиловый эфир
6.36. Фенилэтилпрениловый эфир
6.37. Фенилэтилциклогексиловый эфир

6.38–6.70. Альдегиды — с. 394

6.38. Бензальдегид
6.39. Фенилацетальдегид
6.40. 4-Метилбензальдегид
6.41. 4-Метилфенилацетальдегид
6.42. Фенилпропионовый альдегид
6.43. Гидратроповый альдегид
6.44. Коричный альдегид
6.45. 3-Фенилбутаналь
6.46. Френаль
6.47. Жасморанг
6.48. Цикламенальдегид
6.49. Лилиальальдегид
6.50. *пара*-Трет. бутилгидрокоричный альдегид
6.51. Куминовый альдегид
6.52. Флоралозон
6.53. Метилцикламенальдегид
6.54. *пара*-Метилгидратроповый альдегид
6.55. *пара*-Изопропилгидратроповый альдегид
6.56. Метилфенилпентаналь
6.57. *альфа*-Метилкоричный альдегид
6.58. Жасминальдегид
6.59. Гексилкоричный альдегид
6.60. Салициловый альдегид
6.61. Ванилин
6.62. Ваниналь
6.63. Вератровый альдегид
6.64. Гелиотропин
6.65. Пиперонилпропаналь
6.66. Анисовый альдегид
6.67. Анисилпропаналь
6.68. *орто*-Метоксикоричный альдегид
6.69. Феноксиацетальдегид
6.70. *пара*-Метилфеноксиацетальдегид

6.71–6.88 Ацетали — с. 419

6.71. Диметилацеталь фенилацетальдегида
6.72. Диизоамилацеталь фенилацетальдегида
6.73. Дигеранилацеталь фенилацетальдегида
6.74. Этиленгликольацеталь фенилацетальдегида
6.75. Глицеринацеталь фенилацетальдегида
6.76. 2-метилпентан-2,4-диолацеталь фенилацетальдегида
6.77. Диметилацеталь гидратропового альдегида
6.78. Этиленгликольацеталь гидратропового альдегида
6.79. Пропиленгликольацеталь гидратропового альдегида
6.80. Диэтилацеталь гелиотропина
6.81. Диметилацеталь жасминальдегида
6.82. Диэтилацеталь жасминальдегида
6.83. Диметилацеталь 2,2-диметил-3-фенилпропаналя
6.84. Этилфенилэтилацеталь ацетальдегида
6.85. Пропилфенилэтилацеталь ацетальдегида
6.86. Гиацинталь
6.87. Флоронал
6.88. Дифенилэтилацеталь ацетальдегида

6.89–6.101. Кетоны — с. 429

6.89. Ацетофенон
6.90. *пара*-Метилацетофенон
6.91. Бензилацетон
6.92. Метилфенилпентанон
6.93. Метилфенилгексанон
6.94. Фраванон
6.95. Ацетиланизол
6.96. Кетон малины
6.97. Метоксифенилбутанон
6.98. Пиперонилацетон
6.99. Цингерон
6.100. Бензофенон
6.101. Метилнафтилкетон

6.102–6.185.Сложные эфиры — с. 438

6.102. Бензилформиат
6.103. Бензилацетат
6.104. Бензилпропионат
6.105. Бензилбутират
6.106. Бензилизобутират
6.107. Бензилизовалерат
6.108. Бензиллаурат
6.109. Бензилбензоат
6.110. Бензилсалицилат
6.111. Бензилциннамат
6.112. Бензилфенилацетат
6.113. Фенилэтилформиат
6.114. Фенилэтилацетат
6.115. Фенилэтилпропионат
6.116. Фенилэтилбутират
6.117. Фенилэтилизобутират
6.118. Фенилэтилизовалерат
6.119. Фенилэтилтиглат
6.120. Феенилэтил-2-метилбутират
6.121. Фенилэтилпивалат
6.122. Фенилэтилбензоат
6.123. Фенилэтилсалицилат
6.124. Фенилэтилциннамат
6.125. Фенилэтилфенилацетат
6.126. Фенилпропилацетат
6.127. Фенилпропилпропионат
6.128. Фенилпропилизобутират
6.129. Фенилпропилциннамат
6.130. 4-Метилбензилацетат
6.131. Гидратропилацетат
6.132. Куминилацетат
6.133. Циннамилацетат
6.134. Циннамилбутират
6.135. Циннамилциннамат
6.136. Амилциннамилацетат
6.137. Стиралилацетат
6.138. Стиралилпропионат
6.139. Трихлорметилфенилкарбинилацетат
6.140. 3-Фенил-3-бутенилацетат
6.141. Диметилбензилкарбинилацетат
6.142. Диметилбензилкарбинилпропионат
6.143. Диметилбензилкарбинилбутират
6.144. Диметилбензилкарбинилизобутират
6.145. Диметилфенилэтилкарбинилацетат
6.146. Диметилфенилэтилкарбинилизобутират
6.147. Метилэтилфенилэтилкарбинилацетат
6.148. Фенилпропенилацетат
6.149. Гелиотропилацетат
6.150. Фенилгликольдиацетат
6.151. Метилфенилпентилацетат
6.152. Метилбензоат
6.153. Этилбензоат
6.154. Изобутилбензоат
6.155. Изоамилбензоат
6.156. н-Амилбензоат
6.157. Гексилбензоат
6.158. Пренилбензоат
6.159. *цис*-Гексенилбензоат
6.160. Этил-3-гидрокси-3-фенилпропионат
6.161. Метилциннамат
6.162. Этилциннамат
6.163. Изобутилциннамат
6.164. Изоамилциннамат
6.165. Метил-4-метилбензоат
6.166. Диэтилфталат
6.167. Метилсалицилат
6.168. Метил-2-метоксибензоат
6.169. Этилсалицилат
6.170. Бутилсалицилат
6.171. Изобутилсалицилат
6.172. Изоамилсалицилат
6.173. н-Амилсалицилат
6.174. Гексилсалицилат
6.175. Пренилсалицилат
6.176. *цис*-3-Гексенилсалицилат
6.177. Циклогексилсалицилат
6.178. Фенилуксусная кислота
6.179. Метилфенилацетат
6.180. Этилфенилацетат
6.181. Бутилфенилацетат

УВАЖАЕМЫЕ ЧИТАТЕЛИ!

Не забудьте подписаться на ежемесячный теоретический и научно-практический журнал "ПИЩЕВАЯ ПРОМЫШЛЕННОСТЬ" и приложение к нему теоретический журнал "ХРАНЕНИЕ И ПЕРЕРАБОТКА СЕЛЬХОЗСЫРЬЯ". На наши журналы можно подписаться

на любой срок (месяц, квартал, полугодие)
на любое количество экземпляров
в любом отделении "Роспечати".

Индекс журнала "Пищевая промышленность" 70749, журнала "Хранение и переработка сельхозсырья" 71256.

Распространением журнала "Пищевая промышленность" за рубежом занимается акционерное общество "Международная книга" через своих контрагентов в соответствующих странах. Адреса фирм-агентов Вы можете узнать в АО "Международная книга": *Россия, 117049, Москва, Большая Якиманка, 39.*

Телефон: (095) 238-49-67, 238-49-30, 238-40-77
Телефакс: (095) 230-21-17, 238-46-34
Телекс: 411160.

Если Вы не смогли подписаться на журналы в почтовом отделении в установленном порядке, не огорчайтесь! Для оформления подписки на I полугодие 1994 г. (6 номеров журнала "Пищевая промышленность" и (или) 3 номера журнала "Хранение и переработка сельхозсырья") Вам необходимо перечислить (с учетом доставки и НДС) в первом случае 3600 руб. (для читателей из России) и 7800 руб. (для других стран СНГ), во втором случае — соответственно 1200 и 1800 руб. на расчетный счет редакции: р/с 2609835 в Сокольническом филиале Московского индустриального банка МФО 201218, код 5414, участник 10.

Копию платежного поручения и заполненную карточку подписчика следует направить в адрес редакции: 107807, Россия, Москва, Садовая-Спасская, 18, издательство "Колос", журнал "Пищевая промышленность". После их получения редакция гарантирует высылку номеров журналов по мере выхода изданий из печати. Журналы можно также приобрести в редакции за наличный счет.

Телефон для справок: **207–17–70.**

Редакция журнала "Пищевая промышленность" выпустила в свет в 1993 г.

"Сборник международных методов анализа сусла и вина"

Перевод и редакция профессора Н. А. Мехузла

В сборник включены методы, прошедшие промышленную апробацию в ведущих винодельческих странах мира и рекомендованные как арбитражные и для текущих определений Международной организацией винограда и вина.

Цена книги 4000 руб.

Сборник рассылается по территории России наложенным платежом после предоплаты его стоимости, а за пределы России после предоплаты стоимости сборника и почтовых расходов на его пересылку.

Всю предоплату следует направлять по адресу:
107807, ГСП-6, Москва, Б-78, Садовая-Спасская, 18, комн. 601, редакция журнала "Пищевая промышленность". Телефон 207-17-70.

За наличный расчет сборник можно приобрести непосредственно в редакции.

Станислав Амвросьевич ВОЙТКЕВИЧ

865 ДУШИСТЫХ ВЕЩЕСТВ ДЛЯ ПАРФЮМЕРИИ И БЫТОВОЙ ХИМИИ

Технический редактор *Чумак М. В.*
ЛР № 020747 от 02.03.93
Сдано в набор 21.01.94 Подписано в печать 11.05.94
Формат бумаги 60×90/16 Бум. офс. Литературная гарнитура
Офсетная печать Усл. печ. л. 37,25 Уч.-изд. л. 27,09
Тираж 1000 экз. Заказ 5414 Цена договорная

"Пищевая промышленность",
107807, Москва, 5–78, Садовая-Спасская, 18.
Производственно-издательский комбинат ВИНИТИ
140010, Люберцы 10, Московской обл., Октябрьский просп., 403